REAKTIONSKINETIK VON AUGERPROZESSEN IN IONISCHEN HALBLEITERN

Dissertation
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften

der Fakultät für Physik
der Eberhard-Karls-Universität
zu Tübingen

vorgelegt von

Fritz Tröster
aus Hessigheim

1979

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41548928_0011

REAKTIONSKINETIK VON AUGERPROZESSEN IN IONISCHEN HALBLEITERN

Dissertation
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften

der Fakultät für Physik
der Eberhard-Karls-Universität
zu Tübingen

vorgelegt von

Fritz Tröster
aus Hessigheim

1979

Tag der mündlichen Prüfung: 15. Februar 1979

Dekan: Prof. Dr. H. Mauder

1. Berichterstatter: Prof. Dr. H. Stumpf

2. Berichterstatter: Prof. Dr. F. Wahl

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Offsetdruck Spengler
Lessingstraße 4 · 7401 Neustetten 1
Telefon (07472) 22145

Vorab möchte ich Herrn Professor Dr. H. Stumpf für die Überlassung des in dieser Arbeit behandelten Themas und für viele hilfreiche Gespräche herzlich danken. Besonders bin ich bei der Gestaltung dieser Arbeit über die Tatsache erfreut, einen abgerundeten Themenkomplex behandeln zu können, und weniger ein isoliert vorliegendes Problem.

Bei dieser Bearbeitung bin ich den Mitarbeitern der Arbeitsgruppe "Festkörperphysik" am Lehrstuhl von Prof. Dr. H. Stumpf für viele Gespräche und klärende Diskussionen zu Dank verpflichtet. Insbesondere danke ich Herrn Dr. I. Rojas-Hernandez für Hinweise zur Klärung von Detailproblemen und viele Literaturangaben über Ionenkristalle mit Farbzentren. Herrn Prof. Dr. F. Wahl danke ich für die kritische Durchsicht des Manuskripts und viele zusätzliche Hinweise. Auch möchte ich das Zentrum für Datenverarbeitung der Universität Tübingen und Stuttgart für die großzügige Überlassung von Rechenzeit für die numerischen Auswertungen erwähnen.

Meiner Frau Hildegard danke ich herzlich für die enormen Lasten der gleichzeitigen Berufsausübung als Lehrerin und Hausfrau zur finanziellen und familiären Versorgung unserer Tochter und mir.

Inhaltsverzeichnis

	Seite
1. Einleitung	1
2. Definitionen	4
3. Grundlagen der Theorie	8
4. Augerübergänge an Farbzentren	13
5. Berechnung phononen-assistierter Auger-Übergangswahrscheinlichkeiten	18
6. Reaktionskinetik für Augerprozesse in Ionenkristallen mit Farbzentren	27
7. Störstellenverteilungen	48
8. Augerübergang ($F^* \longrightarrow F/F^* \longrightarrow c$)	53
9. Augerübergang ($F^* \longrightarrow F/F' \longrightarrow c$)	63
10. Augerübergänge mit äußerem elektrischen Feld	67
11. Stoßionisationsprozesse: ($F^* \longrightarrow c$), ($F' \longrightarrow c$) und ($F \longrightarrow c$)	74
12. Auger-Rekombinationsprozesse: ($c \longrightarrow F^*$), ($c \longrightarrow F'$) und ($c \longrightarrow F$)	82
13. Stationäres Nichtgleichgewicht bei äußeren Einflüssen	88
14 Quantenausbeute des F^*-Zentrums	97
15. Zeitliche Vorgänge im Reaktionssystem	99
Anhang A: Thermisches Gleichgewicht im Leitungsband	107
Anhang B: Elektronisches Matrixelement für $W^A(F,F^*/c,F^*)$	112
Anhang C: Numerisches Verfahren und FORTRAN-Programme für den Augerübergang ($F^* \longrightarrow c/F^* \longrightarrow F$)	116
Anhang D: Elektronische Matrixelemente der Ionisationsprozesse ($F^* \longrightarrow c$), ($F \longrightarrow c$) und ($F' \longrightarrow c$)	127
Anhang E: Elektronisches Matrixelement für $W^A(F,F^*/c,F')$	135
Anhang F: Kristall- und Rechenparameter von KI	137
Anhang G: Normierungsfaktor der verschobenen Maxwell-Boltzmann-Verteilung	138

Seite

Anhang H: Elektronische Anteile bei Auger-Rekombinationen 140

Anhang I: Einteilchenübergänge an Farbzentren in KI 142

Literaturverzeichnis 144

Tabellen:

Tab. 1: Augerübergangswahrscheinlichkeit $W^{A}(F,F^{*}/c,F^{*})$ 60

Tab. 2: Augerübergangswahrscheinlichkeit $W^{A}(F,F^{*}/c,F')$ 64

Tab. 3: Experimentelle Werte der verschiedenen Bandmechanismen in KI 72

Tab. 4: Stoßionisationswahrscheinlichkeit $W^{SI}(c,F^{*})$ für KI 77

Tab. 5: Übergang $W^{SI}(c,F')$ in KI 78

Tab. 6: Übergang $W^{SI}(c,F)$ in KI 80

Tab. 7: Auger-Rekombination $W^{AR}(F^{*},c)$ 84

Tab. 8: Auger-Rekombination $W^{AR}(F',c)$ 86

Tab. 9: Auger-Rekombination $W^{AR}(F,c)$ 86

Tab. 10: Kristall- und Rechenparameter von KI 137

Tab. 11: Einteilchenübergangswahrscheinlichkeiten für KI 143

Abbildungen:

Abb. 1: Verteilungsdichten von Störzentren 52

Abb. 2: Konfigurationskoordinaten-Modell für den Augerübergang 58

Abb. 3: Augerübergangswahrscheinlichkeit $W^{A}(F,F^{*}/c,F^{*})$ in KI 60

Abb. 4: Differentielle Übergangswahrscheinlichkeit $W_{\vartheta}^{A}(F,F^{*}/c,F^{*})$ in KI 61

Abb. 5: Augerübergang $W^{A}(F,F^{*}/c,F^{*})$ in KI 65

Abb. 6: Differentielle Übergangswahrscheinlichkeit $W_{\vartheta}^{A}(F,F^{*}/c,F')$ in KI 66

Seite

Abb. 7: Elektronenbeweglichkeit für KI bei $n_s = 7.5\ 10^{16}\ cm^{-3}$ nach /36/ 73

Abb. 8: Stoßionisationswahrscheinlichkeit $W^{SI}(c,F^*)$ über der Temperatur 77

Abb. 9: Stoßionisationswahrscheinlichkeit $W^{SI}(c,F^*)$ über dem elektrischen Feld 78

Abb. 10: Übergang $W^{SI}(c,F')$ in KI 79

Abb. 11: Übergang $W^{SI}(c,F)$ in KI 79

Abb. 12: Auger-Rekombination $W^{AR}(F^*,c)$ 85

Abb. 13: Auger-Rekombination $W^{AR}(F',c)$ 85

Abb. 14: Auger-Rekombination $W^{AR}(F,c)$ 87

Abb. 15: Stationärer Zustand n_L des Systems (13.19) 96

Abb. 16: Zeitliches Verhalten der F-Zentren bei Einstrahlung 100

Abb. 17: Zeitliches Verhalten der F^*-F'-Zentren und Leitungsbandelektronen bei Einstrahlung 102

Abb. 18: Verhalten der F-Zentren beim Ein- und Ausschaltvorgang 103

Abb. 19: Normierte log. Darstellung der F^*-Zentren-Konzentration des Abklingvorgangs 103

Abb. 20: Einschwingvorgang der Leitungsbandelektronen beim elektrischen Feld ohne F'-Zentren-Beteiligung 104

Abb. 21: Einschwingvorgang der Leitungsbandelektronen beim elektrischen Feld mit F'-Zentren-Beteiligung 105

Abb. 22: F'-Produktion bei äußerem elektrischen Feld 105

Abb. 23: "Resonanzverhalten" im Leitungsband bei äußerem elektrischen Feld 106

Abb. 24: Gauß-Laguerre-Integrationsverfahren (Beispiel) 133

1. Einleitung

Optische Eigenschaften von Störzentren in Halbleitern werden meistens in der Ein-Störstellen-Approximation beschrieben. In diesem Modell sind alle Prozesse, die an einem Zentrum ablaufen, unabhängig von allen übrigen Zentren. Hat man es mit höher dotierten Halbleitern zu tun, muß diese Näherung aufgegeben werden, um Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Störzentren beschreiben zu können. Ein solcher Wechselwirkungsprozeß ist durch die Abgabe von Anregungsenergie eines Störzentrums auf ein anderes gegeben. Für seine Erklärung kommen zwei Möglichkeiten in Frage: Zum einen die erneute Absorption von Strahlung durch zerfallende angeregte Störzentren, zum anderen die direkte Coulomb- und Austauschwechselwirkung zwischen Zentren, die auch Auger-Prozesse genannt werden.

In dieser Arbeit diskutieren wir diese letztgenannten Prozesse in Halbleitern. Dabei verwenden wir für unser Grundmodell eine von Stumpf und Mitarbeitern /1,2,4,6,7,9,15/ entwickelte Theorie für Halbleiter. In dieser Theorie wird in einem ersten Schritt ein Mikroblock-Modell vorgeschlagen, um die Ein-Störstellenprozesse zu beschreiben. Diese Mikroblöcke werden in einem zweiten Schritt zu einem Mosaikblock zusammengesetzt, in dem dann die oben beschriebenen Wechselwirkungsprozesse ablaufen. Ein solcher Mosaikblock soll auch unser Grundmodell für die weiteren Rechnungen bilden.

In der Literatur existieren viele Abhandlungen über Auger-Prozesse. So gibt es von Landsberg und Mitarbeitern /16 - 21/ viele Veröffentlichungen. In diesen Arbeiten werden Auger-Rekombinationsraten und Stoßionisationskoeffizienten berechnet. Dabei beschränken sich Landsberg et al. auf den rein elektronischen Anteil ohne die Kopplung der Phononen. Diese Näherung läßt sich für Halbleiter mit einer geringen Energielücke oder niedrigen Störstellenenergien begründen. Ähnliche Berechnungen wurden auch von Haug /22,26/ und Schöne /23/ für Band-Band Übergänge angestellt.

Andererseits gibt es nur wenige Veröffentlichungen über phononassistierte Augerübergänge. Eagles /24/ benutzt die Störungstheorie zweiter Ordnung, um Phononen über die Elektron-Phonon-Wechselwirkung an den Übergängen zu beteiligen. Eine andere Methode wird von Rosenthal /25/ verwendet. Er schlägt eine unitäre Transformation

des Störteils des Gesamt-Hamiltonoperators vor, der eine Elektron-Elektron- und eine Elektron-Phonon-Wechselwirkung enthält. Auf diese Weise werden Augerübergänge mit Beteiligung von bis zu zwei Phononen gewonnen.

In der vorliegenden Arbeit sollen bei den Augerprozessen beliebig viele Phononen beteiligt sein. Dazu verwenden wir das Konzept der dynamischen Kopplung der Wellenfunktionen an die Phononen /64,11, 12,63/.

Zusätzlich studieren wir die gesamte Reaktionskinetik von Augerprozessen in Ionenkristallen mit Farbzentren. Diese Kinetik des Gesamtsystems (Mosaikblock mit äußeren Einflüssen) folgt einer irreversiblen stochastischen Pauli-Master-Dynamik /9,1/. Um aus dieser auf experimentell bestimmbare Observable zu kommen, müssen wir die in der Phänomenologie wohl bekannten "rate equations" für die mittleren Besetzungszahlen herleiten. Bei dieser Ableitung kommen zusätzliche Kristalleigenschaften für die Übergangswahrscheinlichkeiten ins Spiel. So werden manche Wahrscheinlichkeiten von der Konzentration der Störstellen abhängig, während andere durch die Energieverteilung der Leitungsbandelektronen bestimmt werden, die wiederum wesentlich von äußeren elektrischen Feldern abhängen.

Konkret gehen wir dabei so vor, daß wir, nachdem wir einige grundlegende Definitionen in Abschnitt 2 und die Grundlagen unserer mikroskopischen Theorie in Abschnitt 3 angegeben haben, den für Augerübergänge verantwortlichen Störoperator $\hat{K}^{s}$ herleiten und dessen Auswertung vornehmen. Somit können wir uns bereits um die unseren Kristall als Makroobjekt bestimmenden "rate equations" kümmern. Die nächste Aufgabe liegt darin, eine numerische Auswertung der diese Gleichung bestimmenden Größen vorzunehmen. Als Abschluß dieser Arbeit können wir dann einen Bezug zum Experiment herstellen, indem wir einmal das stationäre Nichtgleichgewicht, zeitliche Vorgänge beim Ein- und Ausschalten äußerer Einflüsse und Fluoreszenzausbeuten unseres Systems untersuchen.

Abschließend möchten wir den Grundgedanken dieser Arbeit besonders betonen. Wir wollen hier am vorgegebenen Beispiel von Augerprozessen in einem speziellen Halbleitermodell eine Gesamtdarstellung geben, angefangen von der die Mikrodynamik bestimmenden Schrödingergleichung bis hin zu experimentell meßbaren, aus einem Gleichungs-

system gewonnenen Observablen. Dadurch treten automatisch Detailprobleme in den Hintergrund, und manche in den numerischen Rechnungen eingeführten Näherungen können durch spezielle Untersuchungen ausgeräumt werden.

2. Definitionen

Wir stellen in diesem Abschnitt häufig vorkommende Größen zusammen, die bei der Ableitung der Übergangswahrscheinlichkeiten vorkommen. Dadurch, so hoffen wir, können wir eine bessere Übersicht der gedrängten Rechnungen in den einzelnen Abschnitten erreichen.

(a) Kristallstruktur

e : = Elektronenladung;

$\mathcal{R}_i$: = Ort des i-ten Elektrons;

l : = Index der l-ten Elementarzelle im idealen Gitter;

μ : = Index der Ionen in der Elementarzelle;

$e_{l\mu}$: = Ladungs des $l\mu$ -ten Ionenkerns;

$\mathcal{R}^0_{l\mu}$: = ideale Gitterposition des $l\mu$ -ten Kerns;

$\mathcal{R}_{l\mu}$: = Ort des $l\mu$ -ten Kerns im gestörten Gitter;

$\mathcal{R}^n_{l\mu}$: = statische Gitterstelle des $l\mu$ -ten Kerns im gestörten Gitter, wenn das Störelektron im Zustand n ist;

$a_{l\mu}$: = $(e_{l\mu} + \sum_{\alpha_{l\mu}} e)$ Ladung des $l\mu$ -ten Ions; (2.1)

$\mathcal{W}^0_{l\mu}$: = $\mathcal{R}_{l\mu} - \mathcal{R}^0_{l\mu}$ ionische Verschiebung aus der idealen Gitterlage ; (2.2)

$X^n_{l\mu}$: = $\mathcal{R}_{l\mu} - \mathcal{R}^n_{l\mu}$ ionische Verschiebung aus der statischen Position des gestörten Gitters, wenn das Störelektron im Zustand n ist; (2.3)

l^i_μ , $1 \leq i \leq s$: = Gitterorte der Störstellen; (2.4)

$\sum_{\{l\mu\}}$: = Summe über alle Gitterpunkte, ausgenommen die Gitterorte der Störstellen; (2.5)

$\sum'_{i,j}$: = $\sum_{i,j}$ mit $i = j$ (2.6)

$C(\mathcal{R}, \mathcal{R}') = |\mathcal{R} - \mathcal{R}'|^{-1}$

$C(\mathcal{R}, \mathcal{R}_{l\mu}) = |\mathcal{R} - \mathcal{R}_{l\mu}|^{-1}$ Coulomb Potentiale; (2.7)

$C(\mathcal{R}, l_\mu) = |\mathcal{R} - \mathcal{R}^0_{l\mu}|^{-1}$

m : = Elektronenmasse; (2.8)

M_{l_μ} : = Masse des l_μ -ten Ionenkerns. (2.9)

(b) Quantenmechanische und thermodynamische Größen

β : = $(kT)^{-1}$ Boltzmann-Faktor; (2.10)

Z_{Ph} : = Zustandssumme des Phononensystems; (2.11)

$f_m(T)$: = $Z_{Ph}^{-1} e^{-\beta E_m^n}$ Gleichgewichtsverteilung des Phononensystems; (2.12)

$p_\nu(t)$: = Besetzungswahrscheinlichkeit der ν -ten Photonschwingung; (2.13)

$\hat{\varrho}(t)$: = statistischer Operator des gesamten Mosaikblocksystems; (2.14)

$\chi_n^c(\sigma, \mathcal{R})$: = gesamte Elektronenwellenfunktion (2.15)

$\varphi_m^n(\mathcal{R})$: = gesamte Gitterwellenfunktion des Mosaikblocks; (2.16)

α_{l_μ} : = Quantenzahl der Schalen des l_μ -ten Ions; (2.17)

$\eta, \varkappa \in \mathbb{M} := \{\varrho_\beta \mid \varrho = l_\mu^i$ bzw. c mit $1 \le i \le s$ & $\beta = 1, \ldots, r, k\}$ Quantenzahlen der Störzustände; (2.18)

$\psi_\eta(\sigma, \mathcal{R})$: = Einteilchenwellenfunktion zum Störzustand η; (2.19)

$\alpha_{\alpha l_\mu}^n(\sigma, \mathcal{R})$: = Einteilchenfunktion zur Quantenzahl α des l_μ -ten Ions; (2.20)

$\mathfrak{M}_{l_\mu}^n$: = $\sum_{\alpha_{l_\mu}} e \int \alpha_{\alpha_{l_\mu}}^{n*} \alpha_{\alpha_{l_\mu}}^n (\sigma - \mathcal{R}_{l_\mu})\, d\sigma$ elektronisches Dipolmoment des l_μ -ten Ions; (2.21)

q_t^n : = $\sum_{\{l_\mu\}} B_{t, l_\mu}^n X_{l_\mu}^n$ Normalkoordinaten des Mosaikblocks; (2.22)

$\beta^n(X^n)$: = Variationsparameter der dynamischen Elektronenwellenfunktion als Funktion der Auslenkungen (1.3); (2.23)

$a_t^{nn'}$: = Normalkoordinaten-Verschiebungen bei einem Elektronenübergang; (2.24)

$\gamma_m^n(E_m^n)$: = Linienbreite des Phononenzustandes m mit der Energie E_m^n ; (2.25)

E_m^n : = Energieeigenwert des Mosaikblocksystems; (2.26)

$\overline{E_m^n}$: = Energiewert des Mosaikblocks in harmonischer Näherung; (2.27)

(c) Rechenhilfen für phonon-assistierte Auger-Übergänge

$$\Delta^{\gamma\alpha,\gamma'\alpha'}_{m,m'} := \left(1 - \delta_{\gamma\alpha,\gamma'\alpha'}\,\delta_{mm'}\right); \tag{2.28}$$

$s_t, s'_t, \bar{s}_t, \bar{s}'_t, s^*_t, \bar{s}'^*_t, s'^*_t, \gamma_t, \bar{\gamma}_t,$ $\gamma^*_t, \bar{\gamma}^*_t$ ≡ Parameter für erzeugende Funktionen; (2.29)

$$p^\gamma_t := \sqrt{\frac{\hbar\omega^\gamma_t}{2}}\left(a^{\gamma\dagger}_t - a^\gamma_t\right); \tag{2.30}$$

$a^{\gamma\dagger}_t, a^\gamma_t$ Erzeuger und Vernichter für harmonische Schwingungen der Frequenz ω^γ_t; (2.31)

$$\hat{U}^\gamma_t := e^{ip^\gamma_t a^{\gamma\gamma'}_t}; \tag{2.32}$$

$$A^\gamma_t := \frac{\omega^\gamma_t - \omega^{\gamma'}_t}{2\left(\omega^\gamma_t + \omega^{\gamma'}_t\right)}; \tag{2.33}$$

$$B^\gamma_t := \frac{\omega^{\gamma\,2}_t - \omega^{\gamma'\,2}_t}{8\,\omega^\gamma_t\,\omega^{\gamma'}_t}; \tag{2.34}$$

$$\hat{V}^\gamma_t := e^{-A^\gamma_t (a^\gamma_t)^2}\, e^{B^\gamma_t (a^{\gamma\dagger}_t)^2}; \tag{2.35}$$

$$C^\gamma_{m_t} := \langle \phi^\gamma_{m_t} | \hat{V}^{\gamma\dagger}_t \hat{V}^\gamma_t | \phi^\gamma_{m_t} \rangle; \tag{2.36}$$

$$\alpha^{\gamma\gamma'}_t := \sqrt{\frac{2\omega^\gamma_t}{\hbar}}\, a^{\gamma\gamma'}_t; \tag{2.37}$$

$$d^{\gamma\gamma'(*)}_{1,t} := -\alpha^{\gamma\gamma'}_t + \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega^\gamma_t}}\,\gamma^{(*)}_t; \tag{2.38}$$

$$d^{\gamma\gamma'(*)}_{2,t} := \alpha^{\gamma\gamma'}_t + \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega^\gamma_t}}\,\gamma^{(*)}_t; \tag{2.39}$$

$$d_{3,t}^{\pi'(*)} := \frac{\hbar}{2\omega_t^\pi}\gamma_t^{(*)2} - \left(\alpha_t^{\pi'}\right)^2 - 2\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_t^\pi}}\,\alpha_t^{\pi'}\,\gamma_t^{(*)} \tag{2.40}$$

$$f_{0,t}^{\pi'} := \frac{A_t^\pi - B_t^\pi}{\left(1-\exp\{-\beta\hbar\omega_t^\pi\}\right)^2}\left(d_{2,t}^{\pi'}\,d_{2,t}^{\pi'*} - d_{1,t}^{\pi'}\,d_{1,t}^{\pi'*}\,e^{-\beta\hbar\omega_t^\pi}\right) \tag{2.41}$$

$$f_{1,t}^{\pi'} := \frac{A_t^\pi + B_t^\pi}{\left(1-\exp\{-\beta\hbar\omega_t^\pi\}\right)^2}\left(d_{1,t}^{\pi'}\,d_{2,t}^{\pi'} + d_{1,t}^{\pi'*}\,d_{2,t}^{\pi'*}\right)e^{-\beta\hbar\omega_t^\pi} \tag{2.42}$$

$$f_{2,t}^{\pi'} := \frac{A_t^\pi + B_t^\pi}{\left(1-\exp\{-\beta\hbar\omega_t^\pi\}\right)^2}\,d_{1,t}^{\pi'}\,d_{1,t}^{\pi'*}\,e^{-2\beta\hbar\omega_t^\pi} \tag{2.43}$$

$$f_{3,t}^{\pi'} := -\frac{A_t^\pi + B_t^\pi}{\left(1-\exp\{-\beta\hbar\omega_t^\pi\}\right)^2}\,d_{2,t}^{\pi'}\,d_{2,t}^{\pi'*} \tag{2.44}$$

$$C_t^{\pi'} := \frac{1}{1-\exp\{-\beta\hbar\omega_t^\pi\}}\,d_{2,t}^{\pi'}\,d_{2,t}^{\pi'*} \tag{2.45}$$

$$b_t^{\pi'} := \frac{\exp\{-\beta\hbar\omega_t^\pi\}}{1-\exp\{-\beta\hbar\omega_t^\pi\}}\,d_{1,t}^{\pi'}\,d_{1,t}^{\pi'*} \tag{2.46}$$

$$g_{\nu_t}^{\pi'} := \sum_{n_1,\dots,n_4}\frac{\left(f_{1,t}^{\pi'}\right)^{n_1}}{n_1!}\frac{\left(-f_{1,t}^{\pi'}\right)^{n_2}}{n_2!}\frac{\left(f_{2,t}^{\pi'}\right)^{n_3}}{n_3!}\frac{\left(f_{3,t}^{\pi'}\right)^{n_4}}{n_4!}\,\delta_{\nu_t,\,n_1-n_2+2n_3-2n_4} \tag{2.47}$$

3. Grundlagen der Theorie

Um Augerprozesse in Halbleitern mit Punktdefekten zu beschreiben, verwenden wir als Deduktionsgrundlage das von Stumpf /4/ eingeführte Mosaikblockmodell eines Kristalls. Der Hamiltonoperator dieses Modells schreibt sich mit äußeren Feldern:

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{S} + \hat{W} + \hat{H}^S + \hat{H}^W , \tag{3.1}$$

wobei die einzelnen Operatoren folgende Bedeutung haben:

- $\hat{K}$ Energieoperator des gesamten Mosaikblocks;
- $\hat{S}$ Operator des freien Strahlungsfeldes;
- $\hat{W}$ Operator des Wärmebades;
- $\hat{H}^S$ Wechselwirkungsoperator des Mosaikblocks mit dem Strahlungsfeld;
- $\hat{H}^W$ Wechselwirkungsoperator des Mosaikblocks mit dem ihn umgebenden Wärmebad.

Wir beschreiben dieses Mosaikblocksystem durch die Basiszustände

$$|a\rangle \equiv |nm\nu\varrho\rangle := |nm\rangle \otimes |\nu\rangle \otimes |\varrho\rangle \tag{3.2}$$

mit den folgenden Repräsentanten der Untersysteme:

- $|nm\rangle$: die dynamischen Elektron-Gitterzustände des Kristalls mit der Elektronenquantenzahl n und der Gitterquantenzahl m ;
- $|\nu\rangle$: die Eigenzustände des Strahlungsfeldes;
- $|\varrho\rangle$: die Zustände des angekoppelten Wärmebades.

Die gekoppelten Elektron-Gitterzustände $|nm\rangle$ berechnen wir in der adiabatischen Näherung /3/. Sie werden in der Koordinatendarstellung mit den Definitionen (1.16) und (1.17) durch

$$\langle \pi R | nm \rangle \equiv \chi_n^c(\pi|R)\,\varphi_m^n(R) =: |\chi_n^c\rangle |\varphi_m^n\rangle \tag{3.3}$$

dargestellt. Natürlich sind im allgemeinen die Zustände (3.2) und (3.3) keine Eigenzustände des Hamiltonoperators (3.1). Dafür erhalten wir aber eine Methode, alle Störungen des Systems, die Übergänge zwischen diesen Basiszuständen verursachen, exakt zu definieren. Unter diesen Übergängen befinden sich auch Augerprozesse. Um sie zu gewinnen, geben wir uns den Kristalloperator vor:

$$\hat{K} := \sum_{\{\ell_\mu\}} -\frac{\hbar^2}{2M_\mu}\Delta_{R_\mu} + \hat{h}(R,r). \tag{3.4}$$

In $\hat{h}(R,r)$ sind die kinetische Energie aller Elektronen und die Coulombwechselwirkungen sämtlicher geladener, sich im Kristall befindlicher Teilchen enthalten. Die Lösung der Gleichungen

$$\hat{h}(R,r)\,|\chi_n^c\rangle = \tilde{U}_n(R)\,|\chi_n^c\rangle \tag{3.5}$$

$$\left[\sum_{\{\ell_\mu\}} -\frac{\hbar^2}{2M_\mu}\Delta_{R_\mu} + \tilde{U}_n(R)\right]|\varphi_m^n\rangle = \tilde{E}_m^n\,|\varphi_m^n\rangle \tag{3.6}$$

führt uns zu den adiabatischen Zuständen (3.3) und einem später zu definierenden Störoperator $\hat{K}^t$.

Zusätzlich wird die Elektronengleichung (3.5) mit dem Hartree-Fockschen Variationsprinzip gelöst, das wiederum keine exakten Eigenlösungen dieser Gleichung liefert. Dafür erhalten wir einen genäherten Energieeigenwert

$$U_n(R) := \operatorname*{Min}_{\{|\chi_n^c\rangle\}} \langle\chi_n^c|\hat{h}(R,r)|\chi_n^c\rangle \tag{3.7}$$

und ein nichtdiagonaler Anteil $\hat{k}^s$ tritt zusätzlich in (3.5) auf. Somit lauten die Gleichungen (3.5) und (3.6):

$$\hat{h}(R,r)\,|\chi_n^c\rangle = \left[U_n(R)\,\mathbb{1} + \hat{k}^s(R)\right]|\chi_n^c\rangle \tag{3.5a}$$

$$\left[\sum_{\{\ell_\mu\}} -\frac{\hbar^2}{2M_\mu}\Delta_{R_\mu} + U_n(R)\right]|\varphi_m^n\rangle = E_m^n\,|\varphi_m^n\rangle. \tag{3.6a}$$

Als Resultat dieser Betrachtungen ergibt sich schließlich eine Aufspaltung des Hamiltonoperators (3.1) in zwei Teile:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 . \tag{3.8}$$

Dabei stellt $\hat{H}_0$ den diagonalen Anteil von $\hat{H}$ mit den Zuständen (3.2) dar:

$$\hat{H}_0 := \sum_{nm\nu\varsigma} |nm\nu\varsigma\rangle\langle nm\nu\varsigma| \hat{H} |nm\nu\varsigma\rangle\langle nm\nu\varsigma| . \tag{3.9}$$

In $\hat{H}_1$ sind die Störoperatoren des Systems zusammengefaßt. Für ihn gilt:

$$\hat{H}_1 := \hat{H} - \hat{H}_0 = \hat{K}^t + \hat{K}^s + \hat{H}^s + \hat{H}^w . \tag{3.10}$$

Die verschiedenen Operatoren in (3.10) werden durch die folgenden Matrixelemente angegeben:

$$K^t_{\substack{nm\nu\varsigma \\ n'm'\nu'\varsigma'}} := (1-\delta_{nn'}\delta_{mm'})\,\delta_{\nu\nu'}\delta_{\varsigma\varsigma'} \sum_{\{\mu\}} -\frac{\hbar^2}{2M_\mu}\Big[\langle\chi^c_n|\Delta_{R_\mu}|\chi^c_{n'}\rangle\langle\varphi^n_m|\varphi^{n'}_{m'}\rangle + \tag{3.11}$$

$$+ 2\langle\chi^c_n|\nabla_{R_\mu}|\chi^c_{n'}\rangle\langle\varphi^n_m|\nabla_{R_\mu}|\varphi^{n'}_{m'}\rangle\Big] ;$$

$$K^s_{\substack{nm\nu\varsigma \\ n'm'\nu'\varsigma'}} := (1-\delta_{nn'}\delta_{mm'})\,\delta_{\nu\nu'}\delta_{\varsigma\varsigma'}\langle\varphi^n_m\chi^c_n|\hat{h}(R,q)|\chi^c_{n'}\varphi^{n'}_{m'}\rangle ; \tag{3.12}$$

$$= (1-\delta_{nn'}\delta_{mm'})\,\delta_{\nu\nu'}\delta_{\varsigma\varsigma'}\langle\varphi^n_m|\hat{k}^s(R)|\varphi^{n'}_{m'}\rangle ,$$

mit $$\hat{k}^s(R) := \langle\chi^c_n|\hat{h}(R,q)|\chi^c_{n'}\rangle ; \tag{3.13}$$

$$H^s_{\substack{nm\nu\varsigma \\ n'm'\nu'\varsigma'}} := (1-\delta_{nn'}\delta_{mm'}\delta_{\nu\nu'})\,\delta_{\varsigma\varsigma'}\langle\chi^c_n\varphi^n_m\nu|\hat{H}^s|\nu'\varphi^{n'}_{m'}\chi^c_{n'}\rangle ; \tag{3.14}$$

$$H^w_{\substack{nm\nu\varsigma \\ n'm'\nu'\varsigma'}} := (1-\delta_{mm'}\delta_{\varsigma\varsigma'})\,\delta_{\nu\nu'}\delta_{nn'}\langle\varphi^n_m|\hat{H}^w|\varphi^{n'}_{m'}\rangle . \tag{3.15}$$

Die durch diese Störungen beschriebenen Effekte sind:

$\hat{K}^t$: ist eine nichtadiabatische Wechselwirkung, die Multiphophononübergänge verursacht.

K^s : stellt die Coulombwechselwirkung zwischen Störelektronen selbst und zwischen Störelektronen und umgebenden Ionen dar. So führt gerade diese Störung zu Augerübergängen.

$\hat{H}^s, \hat{H}^W$: diese beiden Operatoren stellen die bereits am Anfang des Abschnitts angegebenen Wechselwirkungen dar.

Will man das Verhalten des gesamten Mosaikblockmodells beschreiben, muß nach den Besetzungswahrscheinlichkeiten

$$P_{nm\nu s}(t) := Sp\left[\hat{S}(t) P_{nm\nu s}\right], \tag{3.16}$$

mit dem Projektor auf den Zustand (3.1)

$$P_{nm\nu s} := |nm\nu s\rangle\langle nm\nu s| \tag{3.17}$$

gefragt werden. Das zeitliche Verhalten dieser Wahrscheinlichkeiten wird von der Pauli-Master-Gleichung geregelt /1,2,9/:

$$\dot{P}_{nm\nu s}(t) = \sum_{n'm'\nu's'} W^{nm\nu s}_{n'm'\nu's'} \left[P_{n'm'\nu's'}(t) - P_{nm\nu s}(t)\right]. \tag{3.18}$$

Dabei werden die differentiellen Übergangswahrscheinlichkeiten $W^{nm\nu s}_{n'm'\nu's'}$ mit (3.10) in erster Ordnung Störungstheorie und im thermodynamischen Limes durch

$$W^{nm\nu s}_{n'm'\nu's'} := \frac{2\pi}{\hbar} \left|\langle nm\nu s | \hat{H}_1 | n'm'\nu's'\rangle\right|^2 \delta\left(E_{nm\nu s} - E_{nm\nu s}\right) \tag{3.19}$$

gegeben.

In der dynamischen Gleichung (3.18) sind alle möglichen Freiheitsgrade des Systems enthalten. Da wir allein an den elektronischen Reaktionen des Systems interessiert sind, müssen wir alle übrigen aus (3.18) eliminieren. Dies wurde von Stumpf und Mitarbeitern /2, 1,4,14/ unternommen und in folgendem Ergebnis zusammengefaßt:

$$\dot{\rho}_n(t) = \sum_{n'} \left[W^k_{nn'}(T) + W^s_{nn'}(T,t) \right] \rho_{n'}(t) - \sum_{n'} \left[W^k_{n'n}(T) + W^s_{n'n}(T,t) \right] \rho_n(t). \tag{3.20}$$

Die in (3.20) vorkommenden Ausdrücke sind durch (2.10), (2.11) und die zusätzlichen Definitionen erklärt:

$P_n(t)$ Besetzungswahrscheinlichkeit des Elektronenzustandes $|\chi^c_n\rangle$, (3.21)

$W^k_{nn'}(T) := \sum_{mm'} W^K_{nm,n'm'} f_{m'}(T)$ gesamte strahlungslose Übergangswahrscheinlichkeiten, (3.22)

$W^s_{nn'}(T,t) := \sum_{\nu\nu'} \sum_{mm'} W^S_{nm\nu,n'm'\nu'} f_{m'}(T) \rho_{\nu'}(t)$ gesamte strahlende Übergangswahrscheinlichkeiten. (3.23)

In $W^K_{nm,n'm'}$ bzw. $W^S_{nm\nu,n'm'\nu'}$ sind alle strahlungslosen bzw. strahlenden Übergänge der Störung (3.10) zusammengefaßt.

Die in (3.20) angegebene Gleichung für die Elektronen stellt den Ausgangspunkt zur Ableitung von rate-equations für jedes zu beschreibende Modell dar. In einem späteren Abschnitt werden wir sie auf unser Modell anwenden; vorher wollen wir aber explizite Berechnungen von phononassistierten Augerübergängen durchführen.

4. Augerübergänge an Farbzentren

In diesem Abschnitt berechnen wir explizit den in (3.12) definierten Operator für Augerübergänge des speziellen Modells eines Ionenkristalls mit F- und F'-Zentren. Dazu nehmen wir einen idealisierten Mosaikblock mit s Störstellen als Grundlage. Das reguläre Gitter soll von M monovalenten Ionen an den Orten $\mathcal{R}_{\ell\mu}$ gebildet werden. Die Störstellen sind nach (2.4) in $\mathcal{R}_{ij\mu i}$ $(1 \leq i \leq s)$ plaziert. Zusammen mit den N regulären Hüllenelektronen seien, der Ladungsneutralität wegen, s Störelektronen im Kristall vorhanden. Insofern schreibt sich der Hamiltonoperator aller geladenen Teilchen:

$$\hat{h}(\mathcal{R},\mathcal{K}) := \hat{h}_1(\mathcal{R},\mathcal{K}) + \hat{h}_2(\mathcal{K}) + \hat{V}(\mathcal{R}) \tag{4.1}$$

mit

$$\hat{h}_1(\mathcal{R},\mathcal{K}) := \sum_{i=1}^{N+s} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathcal{K}_i} + \sum_{\{\ell\mu\}} e\, e_{\ell\mu}\, C(\mathcal{K}_i, \mathcal{R}_{\ell\mu}) \right) \tag{4.2}$$

$$\hat{h}_2(\mathcal{K}) := \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N+s}{}' e^2\, C(\mathcal{K}_i, \mathcal{K}_j) \tag{4.3}$$

$$\hat{V}(\mathcal{R}) := \frac{1}{2} \sum_{\{\ell\mu\},\{k\varsigma\}}{}' e_{\ell\mu}\, e_{k\varsigma}\, C(\mathcal{R}_{\ell\mu}, \mathcal{R}_{k\varsigma}) . \tag{4.4}$$

Die Definitionen für (4.1) - (4.4) sind in Abschnitt 2 angegeben. Die Störung $\hat{K}^S$ entspricht dem Nichtdiagonalteil des Energieoperators $\hat{h}(\mathcal{R},\mathcal{K})$ und wird durch die Minimalisierung von $\hat{h}(\mathcal{R},\mathcal{K})$ mit der antisymmetrischen Wellenfunktion aller Elektronen im Zustand n

$$|\chi_n^c\rangle = \frac{1}{(N+s)!^{1/2}} \sum_{\lambda_1 \ldots \lambda_{N+s}}{}^{P} (-1)^P \left[\psi_{\gamma_1}(\mathcal{K}_{\lambda_1}) \ldots \psi_{\gamma_s}(\mathcal{K}_{\lambda_s})\, \alpha^n_{\alpha_{k^1 s^1}}(\mathcal{K}_{\lambda_{s+1}}) \ldots \alpha^n_{\alpha_{k^N s^M}}(\mathcal{K}_{\lambda_{N+s}}) \right] \tag{4.5}$$

verursacht. Die Einteilchenfunktionen sind in Abschnitt 2 definiert.

Zu ein und demselben Elektronenzustand n sind diese Einteilchenfunktionen untereinander orthogonal.

Ionenkristalle haben eine relativ große Energielücke zwischen Valenz- und Leitungsband von mehreren (> 5) eV. In unseren Rechnungen beschränken wir uns aus diesem Grunde auf Prozesse zwischen Störstellen und Leitungsband, indem wir voraussetzen:

a) Es gibt keine direkten Anregungen regulärer Hüllenelektronen:

$$a^{n}_{\alpha l_\mu} \equiv a^{n'}_{\alpha l_\mu} .$$

b) Alle Schalen der Ionen sind ausgefüllt.

Für verschiedene Störelektronenzustände treten geringe Veränderungen der elektronischen Hüllenfunktionen bzw. ihrer elektronischen Momente auf. Diese Modifikationen sind für Zustandsberechnungen interessant. Bei Übergängen vernachlässigen wir sie und nehmen an:

c) In einer ersten Näherung verändern sich die Hüllenelektronen bei Störzentrenprozessen nicht:

$$a^{n}_{\alpha l_\mu} \equiv a^{n'}_{\alpha l_\mu} .$$

Insgesamt geben wir uns folgende Annahmen vor:

$$\langle a^{n}_{\alpha l_\mu} \mid a^{n'}_{\beta k_s} \rangle = \delta_{l_\mu, k_s}\, \delta_{\alpha,\beta}\, \delta_{nn'}$$

$$\langle \psi_\eta \mid a^{n'}_{\alpha l_\mu} \rangle = 0 \qquad (4.6)$$

$$\langle \psi_{\eta'} \mid a^{n}_{\alpha l_\mu} \rangle = 0$$

für alle $l_\mu, k_s, \alpha, \beta, n, n'$.

Mit diesen Relationen dehnen wir die Orthogonalität der Einteilchenfunktionen eines Hartree-Fock-Zustandes auf verschiedene Hartree-Fock-Zustände n und n' aus.

Nach einigen Rechnungen sowie den Annahmen (4.6) und den Definitionen (2.1), (2.2), (2.7), (2.21) läßt sich der Störoperator (3.13) auf folgende Art darstellen:

$$\hat{k}^s(R) = \sum_{i=1}^{S} \prod_{\substack{\alpha=1 \\ \alpha\neq i}}^{S} \delta_{\eta_\alpha \eta'_\alpha} \Big\{ \langle \psi_{\eta_i}(u) | -\tfrac{\hbar^2}{2m}\Delta_u | \psi_{\eta'_i}(u) \rangle + \sum_{\{\ell_\mu\}} e \langle \psi_{\eta_i}(u) \Big|$$

$$\Big[M^*_{\ell_\mu} \cdot \nabla_{\ell_\mu} + a_{\ell_\mu} (1 + \gamma M_{\ell_\mu} \cdot \nabla_{\ell_\mu}) \Big] C(u,\ell_\mu) \Big| \psi_{\eta'_i}(u) \Big\rangle + \tag{4.7}$$

$$\sum_{\{\ell_\mu\}} \sum_{\alpha_{\ell_\mu}} \langle \psi_{\eta_i}(u)\, a^{\eta}_{\alpha_{\ell_\mu}}(u') | e^2 C(u,u') | a^{\eta}_{\alpha_{\ell_\mu}}\, \psi_{\eta'_i}(u') \rangle \Big\}$$

$$+ \tfrac{1}{2} \sum_{i,j\neq i}^{S}{}' \prod_{\substack{\alpha=1 \\ \alpha\neq i,j}}^{S} \delta_{\eta_\alpha \eta'_\alpha} \Big[\langle \psi_{\eta_i}(u) \psi_{\eta_j}(u') | e^2 C(u,u') | \psi_{\eta'_i}(u) \psi_{\eta'_j}(u') \rangle - \langle \psi_{\eta_i}(u) \psi_{\eta_j}(u') | e^2 C(u,u') | \psi_{\eta_i}(u') \psi_{\eta_j}(u) \rangle \Big]$$

Zur Ableitung von (4.7) machten wir von der Multipolentwicklung des Coulombpotentials bis zum linearen Term Gebrauch.

Dieser resultierende Operator (4.7) verursacht entweder Ein- oder Zweiteilchenübergänge. Wir müssen deshalb zwei Fälle unterscheiden:

a) Für Einteilchenübergänge muß folgende Bedingung der elektronischen Quantenzahlen $\eta \in \mathbb{M}$ (2.19) erfüllt sein:

$$\eta_\ell \neq \eta'_\ell \qquad \text{für } \underline{\text{ein}} \quad \ell \in \{1, \dots, s\}. \tag{4.8}$$

Insgesamt treten dann (4.7) die jetzt aufgeführten Einteilchenoperatoren auf:

$$\hat{k}^s_{\eta\eta'} := \langle \psi_\eta(u) | -\tfrac{\hbar^2}{2m}\Delta_u | \psi_{\eta'}(u) \rangle \tag{4.9}$$

$$\hat{k}^s_{\eta\eta'} := \sum_{\{\ell_\mu\}} e \langle \psi_\eta \Big| (M^*_{\ell_\mu} \cdot \nabla_{\ell_\mu}) C(u,\ell_\mu) \Big| \psi_{\eta'} \rangle \tag{4.10}$$

$$\hat{k}^{s}_{Phon}(R) := \sum_{\{\ell\mu\}} e\, a_{\ell\mu} \langle \psi_\eta \,|\, (1 + \vec{m}_{\ell\mu} \cdot \vec{\nabla}_{\ell\mu})\, C(u, \ell\mu) \,|\, \psi_{\eta'} \rangle \tag{4.11}$$

$$\hat{k}^{s}_{ex} := \sum_{\{\ell\mu\}\{\ell_\mu\}} e^2 \left\langle \psi_\eta(u)\; a^{u}_{d_{\ell\mu}}(u') \,\middle|\, C(u,u') \,\middle|\, a^{u}_{d_{\ell\mu}}(u)\; \psi_{\eta'}(u') \right\rangle . \tag{4.12}$$

Die Bedeutung dieser Operatoren ist klar:

$\hat{k}^{s}_{Kin}$: stellt einen kinetischen Operator für die Störelektronen dar;

$\hat{k}^{s}_{Dip}$: enthält die Wechselwirkungen der elektronischen Hüllendipole mit den Störzuständen;

$\hat{k}^{s}_{Phon}$: ist der Elektron-Phonon-Wechselwirkungsoperator;

$\hat{k}^{s}_{ex}$: repräsentiert das Austauschpotential mit den Hüllenelektronen.

b) Für Zweiteilchenübergänge gilt andererseits:

Es gibt gleichzeitig zwei ungleiche elektronische Quantenzahlen

$$\eta_\ell \neq \eta'_\ell \quad \text{und} \quad \eta_k \neq \eta'_k \quad \text{für} \quad \ell, k \in \{1, \dots, s\} \;\&\; \ell \neq k . \tag{4.13}$$

Aus (4.7) gewinnt man somit

$$\hat{k}^{s}_{A}(R) := \left\langle \psi_\eta(u)\, \psi_\chi(u') \,\middle|\, e^2 C(u,u') \,\middle|\, \psi_{\eta'}(u)\, \psi_{\chi'}(u') \right\rangle - \left\langle \psi_\eta(u)\, \psi_\chi(u') \,\middle|\, e^2 C(u,u') \,\middle|\, \psi_{\eta'}(u')\, \psi_{\chi'}(u) \right\rangle \tag{4.14}$$

mit $\eta, \chi \in \mathbb{M}$ als Auger-Operator.

Unser Ziel ist die Gewinnung von Augerübergangswahrscheinlichkeiten für die kompletten adiabatischen Zustände (3.3). Diese sind mit (3.12), (3.22) und (4.14) durch

$$W^{A}_{nn'} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{m,m'} e^{-\beta E^{n}_{m}} \left| \langle nm \,|\, \hat{k}^{s}_{A} \,|\, n'm' \rangle \right|^2 \delta\left(E^{n}_{m} - E^{n'}_{m'} \right) \tag{4.15}$$

gegeben.

Als Abschluß sei noch bemerkt, daß die in (4.14) vorkommenden Einteilchenfunktionen der Störzentren von Renn /6/ bereits mit der in Abschnitt 3 dargestellten Theorie berechnet wurden.

5. Berechnung phononen-assistierter Augerübergangswahrscheinlichkeiten

Wie bereits erwähnt, verwenden wir zur Beschreibung phononen-assistierter Übergangswahrscheinlichkeiten eine dynamische Elektronenwellenfunktion /13,7/. Mit den Auslenkungen X_1^n (2.3) und α^2 als Variationsparameter zur Minimalisierung lassen sich diese dynamischen Funktionen durch

$$\Psi_\gamma(x,\mathfrak{R}) = \Psi_\gamma(x,\alpha^2(X^n)) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} \sum_{\{\ell_\mu^\nu\}\cdots\{\ell_\mu^\nu\}} X^n_{\ell_\mu^1} \cdots X^n_{\ell_\mu^\nu} \left\{ \frac{\partial}{\partial X^n_{\ell_\mu^1}} \cdots \frac{\partial}{\partial X^n_{\ell_\mu^\nu}} \Psi_\gamma(x,\alpha^2(X^n)) \right|_0 \Bigg\} \quad (5.1)$$

darstellen. Wir verweisen für deren Berechnung auf /1,13/.

In der Normalkoordinatendarstellung (2.22) schreibt sich (3.1) nach /7/:

$$\Psi_\gamma(x,q^n) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} \sum_{t_1 \cdots t_\nu} q^n_{t_1} \cdots q^n_{t_\nu} \, f^\gamma_{t_1 \cdots t_\nu}(\alpha) \,. \quad (5.2)$$

Diese Darstellung verwenden wir im weiteren für die elektronischen Zustände.

Die Verbindung zwischen Phononenkoordinaten zu verschiedenen Elektronenzuständen liefert uns die Relation:

$$q^{n'}_t = q^n_t + a^{nn'}_t \quad \text{für alle } t \,. \quad (5.3)$$

Für Ionenkristalle mit Farbzentren läßt sich dieser Zusammenhang formal begründen /13/. Im allgemeinen reduziert sich der Zusammenhang von Phononenkoordinaten zwischen verschiedenen Störzuständen nicht auf eine lineare Verschiebung, sondern es können allgemeinere Beziehungen dabei auftreten.

Zusätzlich können wir diese Normalkoordinatenverschiebungen bei Ionenkristallen auf eine geringe Anzahl verringern /13/. Diese Tatsache ist für numerische Berechnungen sehr erfreulich, denn mit der Anzahl der angekoppelten Normalkoordinaten steigt der Rechenaufwand erheblich. Physikalisch findet diese Einschränkung durch den lokalen Charakter der Störschwingungen /5/ ihre Rechtfertigung.

Somit beschränkt sich (5.3) auf:

$$q_t^{\gamma'} = q_t^{\gamma} + a_t^{\gamma\gamma'} \qquad 1 \le t \le d_\gamma$$
$$q_t^{\gamma} = q_t^{\gamma'} \qquad \text{für alle übrigen } t \,. \tag{5.4}$$

Wir fassen die elektronischen Matrixelemente in den Definitionen

$$ {}^{c}A \begin{matrix} t_1 \dots t_\nu \\ s_1 \dots s_\mu \\ t_1' \dots t_{\nu'}' \\ s_1' \dots s_{\mu'}' \end{matrix} := \frac{1}{\nu!\nu'!\mu!\mu'!} \left\langle f^{\gamma}_{t_1 \dots t_\nu}(u)\, f^{\varkappa}_{s_1 \dots s_\mu}(u') \middle| e^2 C(u,u') \middle| f^{\gamma'}_{t_1' \dots t_{\nu'}'}(u)\, f^{\varkappa'}_{s_1' \dots s_{\mu'}'}(u') \right\rangle \tag{5.5}$$

$$ {}^{ex}A \begin{matrix} t_1 \dots t_\nu \\ s_1 \dots s_\mu \\ t_1' \dots t_{\nu'}' \\ s_1' \dots s_{\mu'}' \end{matrix} := \frac{1}{\nu!\nu'!\mu!\mu'!} \left\langle f^{\gamma}_{t_1 \dots t_\nu}(u)\, f^{\varkappa}_{s_1 \dots s_\mu}(u') \middle| e^2 C(u,u') \middle| f^{\gamma'}_{t_1' \dots t_{\nu'}'}(u')\, f^{\varkappa'}_{s_1' \dots s_{\mu'}'}(u) \right\rangle \tag{5.6}$$

zusammen, die die Coulomb- bzw. Austauschwechselwirkung beinhalten. Damit ergibt das Matrixelement (3.12) mit der Definition (2.28) und der dynamischen Wellenfunktion (5.2):

$$ K^{S}_{\substack{\gamma\varkappa,\gamma'\varkappa' \\ m,m'}} = \Delta_{\gamma\varkappa,\gamma'\varkappa'} \sum_{\substack{\nu,t_1 \dots t_\nu \\ \nu',t_1' \dots t_{\nu'}'}} \sum_{\substack{\mu,s_1 \dots s_\mu \\ \mu',s_1' \dots s_{\mu'}'}} \left[{}^{c}A \begin{matrix} t_1 \dots t_\nu \\ s_1 \dots s_\mu \\ t_1' \dots t_{\nu'}' \\ s_1' \dots s_{\mu'}' \end{matrix} - {}^{ex}A \begin{matrix} t_1 \dots t_\nu \\ s_1 \dots s_\mu \\ t_1' \dots t_{\nu'}' \\ s_1' \dots s_{\mu'}' \end{matrix} \right] \cdot \tag{5.7}$$
$$\cdot \left\langle \varphi^{n}_{m} \middle| (q^{\gamma}_{t_1} \dots q^{\gamma}_{t_\nu})(q^{\varkappa}_{s_1} \dots q^{\varkappa}_{s_\mu})(q^{\gamma'}_{t_1'} \dots q^{\gamma'}_{t_{\nu'}'})(q^{\varkappa'}_{s_1'} \dots q^{\varkappa'}_{s_{\mu'}'}) \middle| \varphi^{n'}_{m'} \right\rangle .$$

Die in (5.7) auftretenden Normalkoordinaten-Polynome können durch erzeugende Funktionen dargestellt werden. Wir führen dazu den Differentialoperator

$$ \hat{A} := \Delta_{\substack{\gamma\varkappa,\gamma'\varkappa' \\ m,m'}} \sum_{\substack{\nu,t_1 \dots t_\nu \\ \nu',t_1' \dots t_{\nu'}'}} \sum_{\substack{\mu,s_1 \dots s_\mu \\ \mu',s_1' \dots s_{\mu'}'}} \left[{}^{c}A \begin{matrix} t_1 \dots t_\nu \\ s_1 \dots s_\mu \\ t_1' \dots t_{\nu'}' \\ s_1' \dots s_{\mu'}' \end{matrix} - {}^{ex}A \begin{matrix} t_1 \dots t_\nu \\ s_1 \dots s_\mu \\ t_1' \dots t_{\nu'}' \\ s_1' \dots s_{\mu'}' \end{matrix} \right] \prod_{i=1}^{\nu} \frac{\partial}{\partial \bar{s}_{t_i}} \prod_{i=1}^{\mu} \frac{\partial}{\partial \bar{s}_{s_i}} \times \tag{5.8}$$
$$\times \prod_{i=1}^{\nu'} \frac{\partial}{\partial s_{t_i'}} \prod_{i=1}^{\mu'} \frac{\partial}{\partial \bar{s}_{s_i'}}$$

ein. (5.7) läßt sich mit (5.8) schreiben:

$$ K^{S}_{\substack{\gamma\varkappa,\gamma'\varkappa' \\ m,m'}} = \hat{A} \left\langle \varphi^{n}_{m} \middle| \exp\Big\{ \sum_{\{t\}} q^{\gamma}_{t} \bar{s}_t + \sum_{\{s\}} q^{\varkappa}_{s} \bar{s}_s + \sum_{\{t'\}} q^{\gamma'}_{t'} s_{t'} + \sum_{\{s'\}} q^{\varkappa'}_{s'} s_{s'} \Big\} \middle| \varphi^{n'}_{m'} \right\rangle \Big|_0 \tag{5.9}$$

Berücksichtigen wir nun (5.3) bzw. (5.4) und führen neue Parameter

$$\gamma_t := \varrho_t + \varrho_t' \quad \text{und} \quad \bar{\gamma}_s := \bar{\varrho}_s + \bar{\varrho}_s' \tag{5.10}$$

ein, gewinnt K^S die Gestalt:

$$K^S_{\substack{\gamma\alpha,\gamma'\alpha' \\ m,m'}} = \hat{A} \exp\Big\{\sum_{\{t\}} a_t^{\gamma\gamma'}(\gamma_t - \varrho_t') + \sum_{\{s\}} a_s^{\alpha\alpha'}(\bar{\gamma}_s - \bar{\varrho}_s')\Big\} \Big\langle \varphi_m^{\gamma} \Big| \exp\Big\{\sum_{\{t\}} q_t^{\gamma'}\gamma_t + \sum_{\{s\}} q_s^{\alpha'}\bar{\gamma}_s\Big\} \Big| \varphi_{m'}^{\alpha'} \Big\rangle \Big|_0 \tag{5.11}$$

Die Augerübergangswahrscheinlichkeiten (4.15) nehmen schließlich die Form an:

$$W^A_{mm'}(T) = \hat{A}\hat{A}^* \exp\Big\{\sum_{\{t\}} \big[(\gamma_t - \varrho_t') + (\gamma_t^* - \varrho_t^{*\prime})\big] a_t^{\gamma\gamma'} + \sum_{\{s\}} \big[(\bar{\gamma}_s - \bar{\varrho}_s') + (\bar{\gamma}_s^* - \bar{\varrho}_s^{*\prime})\big] a_s^{\alpha\alpha'}\Big\} \cdot \Gamma(T)\Big|_0 . \tag{5.12}$$

In diesem Ausdruck ist der Phononenanteil in

$$\Gamma(T) := \frac{2\pi}{\hbar} Z^{-1}_{\text{Phon}} \sum_{m,m'} e^{-\beta E^{\alpha'}_{m'}} \Big\langle \varphi_m^{\gamma} \Big| \exp\Big\{\sum_{\{t\}} q_t^{\gamma'}\gamma_t + \sum_{\{s\}} q_s^{\alpha'}\bar{\gamma}_s\Big\} \Big| \varphi_{m'}^{\alpha'} \Big\rangle \cdot \text{[1)]} \cdot \Big\langle \varphi_{m'}^{\alpha'} \Big| \exp\Big\{\sum_{\{t\}} q_t^{\gamma'}\gamma_t^* + \sum_{\{s\}} q_s^{\alpha'}\bar{\gamma}_s^*\Big\} \Big| \varphi_m^{\gamma} \Big\rangle \delta(E^{\gamma}_m - E^{\alpha'}_{m'}) \tag{5.13}$$

zusammengefaßt. Die Sterne * bei den γ_t^* bzw. ϱ_t^* haben nicht die Bedeutung der Komplex-Konjugation von γ_t bzw. ϱ_t, sondern stellen neue Parameter dar. Sie wurden durch die Quadratbildung von (5.11) notwendig.

Durch die anharmonischen Wechselwirkungen der Phononen zeigen die Übergangswahrscheinlichkeiten Resonanzcharakter /2,4/. Beschränken wir uns der Einfachheit wegen auf harmonische Phononen $|\phi_m^{\gamma}\rangle$, läßt sich der Phononenanteil (5.13) in der Diagonalapproximation /7/ schreiben:

$$\Gamma(T) = \frac{1}{\hbar} Z^{-1}_{\text{Phon}} \sum_{m,m'} e^{-\beta \bar{E}^{\alpha'}_{m'}} \Big\langle \phi_m^{\gamma} \Big| \exp\Big\{\sum_{\{t\}} q_t^{\gamma'}\gamma_t + \sum_{\{s\}} q_s^{\alpha'}\bar{\gamma}_s\Big\} \Big| \phi_{m'}^{\alpha'} \Big\rangle \cdot \text{[2)]} \cdot \Big\langle \phi_{m'}^{\alpha'} \Big| \exp\Big\{\sum_{\{t\}} q_t^{\gamma'}\gamma_t^* + \sum_{\{s\}} q_s^{\alpha'}\bar{\gamma}_s^*\Big\} \Big| \phi_m^{\gamma} \Big\rangle \frac{\gamma^{\alpha'}_{m'}}{(\bar{E}^{\gamma}_m - \bar{E}^{\alpha'}_{m'} - \Delta^{\alpha'}_{m'})^2 + \frac{1}{4}(\gamma^{\alpha'}_{m'})^2} . \tag{5.14}$$

---

1) $|\varphi_m^{\gamma}\rangle$ = mit der vollen Wechselwirkung "angezogene" Phononen (dressed phonons)

2) $|\phi_m^{\gamma}\rangle$ harmonische Phononen

Den in (5.14) auftretenden Lorentzfaktor approximieren wir im weiteren durch eine "aufgeweichte" Deltafunktion δ_γ , indem wir die Energieverschiebungen $\Delta^{n'}_{m'}$ vernachlässigen und die jeweiligen Linienbreiten $\gamma^{n'}_{m'}$ durch eine thermisch gemittelte Linienbreite $\gamma(T)$ /10/ ersetzen:

$$\delta_\gamma(E^n_m - E^{n'}_{m'}) := \frac{1}{2\pi}\,\frac{\gamma(T)}{(E^n_m - E^{n'}_{m'})^2 + \frac{1}{4}\gamma^2(T)}\,. \tag{5.15}$$

Zur weiteren Ableitung verwenden wir eine zusätzliche Annahme. Wir setzen voraus, daß die d_η Normalkoordinaten, die an das Störzentrum η gekoppelt sind, von denen des Störzentrums $\varkappa$ verschieden sind:

$$\{ q^\eta_1 \dots q^\eta_{d_\eta} \} \neq \{ q^\varkappa_1 \dots q^\varkappa_{d_\varkappa} \}. \tag{5.16}$$

Physikalisch sei diese Verschiedenheit durch die übliche Störstellenkonzentrationen im Kristall gerechtfertigt. Bei diesen haben die Störzentren einen so großen mittleren Abstand, daß keine Überlappungen der lokalen Schwingungen der einzelnen Störzentren zu erwarten sind. Deshalb wird aus (5.14):

$$\begin{aligned}\Gamma(T) = \frac{2\pi}{\hbar} Z^{-1}_{\text{mon}} \sum_{n,m'} e^{-\beta \bar{E}^n_m} \delta_\gamma(\bar{E}^n_m - \bar{E}^{n'}_{m'}) \prod_{t=1}^{d_\eta} \langle \phi^\eta_{m^\eta_t} | e^{q^\eta_t \bar{\gamma}_t} | \phi^{\eta'}_{m^{\eta'}_t} \rangle \cdot \\ \cdot \langle \phi^{\eta'}_{m^{\eta'}_t} | e^{q^{\eta'}_t \bar{\gamma}^*_t} | \phi^\eta_{m^\eta_t} \rangle \prod_{t=1}^{d_\varkappa} \langle \phi^\varkappa_{m^\varkappa_t} | e^{q^{\varkappa'}_t \bar{\gamma}_t} | \phi^{\varkappa'}_{m^{\varkappa'}_t} \rangle \langle \phi^{\varkappa'}_{m^{\varkappa'}_t} | e^{q^{\varkappa'}_t \bar{\gamma}^*_t} | \phi^\varkappa_{m^\varkappa_t} \rangle .\end{aligned} \tag{5.17}$$

Führen wir eine Fouriertransformation der Lorentzfunktion in (5.17) aus und zerlegen die Gitterenergie (2.27) in

$$\bar{E}^n_m = e^n_m + U^{st}_n \tag{5.18}$$

$$\bar{E}^{n'}_{m'} = e^{n'}_{m'} + U^{st}_{n'} \tag{5.19}$$

mit

$$e^{n}_{m} = \sum_{i=1}^{d_\gamma} \left(m_i^\gamma + \tfrac{1}{2}\right) \hbar\omega_i^\gamma + \sum_{i=1}^{d_\varkappa} \left(m_i^\varkappa + \tfrac{1}{2}\right) \hbar\omega_i^\varkappa + \tilde{e}^{n}_{m} \quad ^{1)}$$

$$e^{n'}_{m'} = \sum_{i=1}^{d_\gamma} \left(m_i^{\gamma'} + \tfrac{1}{2}\right) \hbar\omega_i^{\gamma'} + \sum_{i=1}^{d_\varkappa} \left(m_i^{\varkappa'} + \tfrac{1}{2}\right) \hbar\omega_i^{\varkappa'} + \tilde{e}^{n'}_{m'} , \tag{5.20}$$

erhalten wir

$$\Pi(T) = \frac{2\pi}{\hbar} \int d\tau \; e^{i\tau \Delta U^{st}_{nn'}} \; e^{-i\gamma|\tau|} \; \tilde{\Pi}^{\gamma\gamma'}(T) \; \tilde{\Pi}^{\varkappa\varkappa'}(T) \tag{5.21}$$

unter Verwendung der Definitionen

$$\Delta U^{st}_{nn'} := U^{st}_{n} - U^{st}_{n'} \qquad \text{(statische Elektronenenergie-differenz)} \tag{5.22}$$

$$\tilde{\Pi}^{\gamma\gamma'}(T) := \prod_{t=1}^{d_\gamma} \exp\left\{\frac{i\tau}{2}\hbar(\omega_t^\gamma - \omega_t^{\gamma'})\right\}\left[1 - e^{-\beta\hbar\omega_t^{\gamma'}}\right] \sum_{m_t^\gamma, m_t^{\gamma'}} e^{-\beta m_t^\gamma \hbar\omega_t^\gamma + i\hbar\tau(m_t^\gamma\omega_t^\gamma - m_t^{\gamma'}\omega_t^{\gamma'})} \cdot \tag{5.23}$$

$$\cdot \langle \phi^{\gamma}_{m_t^\gamma} | e^{q_t^{\gamma'} \bar{\gamma}_t} | \phi^{\gamma'}_{m_t^{\gamma'}} \rangle \langle \phi^{\gamma'}_{m_t^{\gamma'}} | e^{q_t^{\gamma'} \bar{\gamma}_t^*} | \phi^{\gamma}_{m_t^\gamma} \rangle$$

$$\tilde{\Pi}^{\varkappa\varkappa'}(T) := \prod_{t=1}^{d_\varkappa} \exp\left\{\frac{i\tau}{2}\hbar(\omega_t^\varkappa - \omega_t^{\varkappa'})\right\}\left[1 - e^{-\beta\hbar\omega_t^{\varkappa'}}\right] \sum_{m_t^\varkappa, m_t^{\varkappa'}} e^{-\beta m_t^\varkappa \hbar\omega_t^\varkappa + i\hbar\tau(m_t^\varkappa\omega_t^\varkappa - m_t^{\varkappa'}\omega_t^{\varkappa'})} \cdot \tag{5.24}$$

$$\cdot \langle \phi^{\varkappa}_{m_t^\varkappa} | e^{q_t^{\varkappa'} \bar{\gamma}_t} | \phi^{\varkappa'}_{m_t^{\varkappa'}} \rangle \langle \phi^{\varkappa'}_{m_t^{\varkappa'}} | e^{q_t^{\varkappa'} \bar{\gamma}_t^*} | \phi^{\varkappa}_{m_t^\varkappa} \rangle$$

und der Identität

$$\tilde{e}^{n}_{m} = \tilde{e}^{n'}_{m'} . \tag{5.25}$$

---

1) $\tilde{e}^{n}_{m}, \tilde{e}^{n'}_{m'}$ Energie aller restlichen harmonischen Phononen

Da die Ausdrücke (5.24) und (5.23) analytisch identisch sind, beschränken wir uns bei der weiteren Auswertung auf einen von beiden. Auf diesen wenden wir das Ergebnis von Koide /11/ über die Transformationseigenschaft zwischen verschiedenen harmonischen Gitterzuständen (siehe die Definitionen (2.30) - (2.36))

$$|\phi^{\nu}_{m^{\nu}_t}\rangle = C^{-1}_{m^{\nu}_t}\, \hat{U}^{\nu}_t\, \hat{V}^{\nu}_t\, |\phi^{\nu'}_{m^{\nu'}_t}\rangle , \tag{5.26}$$

die Eigenwertgleichung des Besetzungsoperators

$$\hat{m}^{\nu'}_t\, |\phi^{\nu'}_{m^{\nu'}_t}\rangle = m^{\nu'}_t\, |\phi^{\nu'}_{m^{\nu'}_t}\rangle \tag{5.27}$$

und dessen Transformationseigenschaft

$$F(\hat{m}^{\nu'}_t) = \hat{U}^{\nu}_t\, \hat{V}^{\nu}_t\, F(\hat{m}^{\nu}_t)\, (\hat{U}^{\nu}_t)^{-1}\, (\hat{V}^{\nu}_t)^{-1} \tag{5.28}$$

an, um aus (5.23) bzw. (5.24) den Ausdruck

$$\begin{aligned}\tilde{T}^{\nu\nu'}(T) = \prod_{t=1}^{d_\nu} e^{-\frac{i\varepsilon}{2}\hbar(\omega^{\nu}_t-\omega^{\nu'}_t)} [1-e^{-\beta\hbar\omega^{\nu'}_t}] \sum_{m^{\nu}_t} e^{-\beta m^{\nu}_t \hbar\omega^{\nu}_t + i\varepsilon m^{\nu}_t \hbar\omega^{\nu}_t} \\ \langle\phi^{\nu}_{m^{\nu}_t}| e^{q^{\nu'}_t \gamma_t} \hat{U}^{\nu}_t \hat{V}^{\nu}_t e^{-i\varepsilon \hat{m}^{\nu}_t \omega^{\nu}_t} \hat{U}^{\nu-1}_t \hat{V}^{\nu-1}_t e^{q^{\nu'}_t \gamma^{*}_t} |\phi^{\nu}_{m^{\nu}_t}\rangle\end{aligned} \tag{5.29}$$

zu gewinnen. Dieser kann nach /7,12/ durch

$$\tilde{T}^{\nu\nu'}(T) = e^{\frac{1}{2}i\varepsilon \sum_{i=1}^{d_\nu} \hbar(\omega^{\nu}_t-\omega^{\nu'}_t)} \prod_{i=1}^{d_\nu} e^{N^{\nu\nu'}_t}\, e^{P^{\nu\nu'}_t} \tag{5.30}$$

ausgedrückt werden, wobei die folgenden Definitionen Verwendung finden

$$e^{N_t^{\pi\pi'}} := \exp\left\{\frac{2e^{-\beta\omega_t^{\pi'}\hbar}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_t^{\pi'}}}\left(d_{1,t}^{\pi\pi'}d_{2,t}^{\pi\pi'}+d_{1,t}^{\pi\pi'*}d_{2,t}^{\pi\pi'*}\right)+\frac{1}{2}\left(d_{3,t}^{\pi\pi'}+d_{3,t}^{\pi\pi'*}\right)\right\}$$

$$\exp\left\{\frac{e^{-\beta\hbar\omega_t^{\pi}}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_t^{\pi}}}\; d_{1,t}^{\pi\pi'}d_{1,t}^{\pi\pi'*}\,e^{i\xi\hbar\omega_t^{\pi}}\right\} \tag{5.31}$$

$$\exp\left\{\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega_t^{\pi'}}}\; d_{2,t}^{\pi\pi'}d_{2,t}^{\pi\pi'*}\,e^{-i\xi\hbar\omega_t^{\pi'}}\right\}$$

$$e^{\mathcal{P}_t^{\pi\pi'}} := e^{f_{0,t}^{\pi\pi'}}\sum_{\nu_t} g_{\nu_t}^{\pi\pi'}\,e^{i\xi\nu_t\hbar\omega_t^{\pi'}}. \tag{5.32}$$

Da die letzten beiden Ausdrücke (5.31) und (5.32) für weitere Berechnungen nicht sehr angenehm sind, führen wir neue Definitionen ein:

$$\sigma_t^{\pi\pi'}(\mu_t,T,\alpha_t^{\pi\pi'}) := \exp\left\{\frac{e^{-\beta\hbar\omega_t^{\pi'}}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_t^{\pi'}}}\left(d_{1,t}^{\pi\pi'}d_{2,t}^{\pi\pi'}+d_{1,t}^{\pi'\pi}d_{2,t}^{\pi'\pi}\right)+\frac{1}{2}\left(d_{3,t}^{\pi\pi'}+d_{3,t}^{\pi\pi'*}\right)\right\}$$

$$\cdot\sum_{s}\frac{(c_t^{\pi\pi'})^{s+\mu_t}\;(b_t^{\pi\pi'})^{s}}{(s+\mu_t)!\,s!} \tag{5.23}$$

$$\Delta E_{\pi\pi'} := \Delta U_{\pi\pi'}^{st} + \frac{1}{2}\hbar\sum_{t=1}^{d_\xi}(\omega_t^{\pi}-\omega_t^{\pi'}). \tag{5.24}$$

Erinnern wir uns, daß die statische Elektronenenergie-Differenz durch

$$\Delta U_{nn'}^{st} = \Delta U_{\pi\pi'}^{st} + \Delta U_{\nu\nu'}^{st} \tag{5.25}$$

gegeben ist und integrieren (5.21) über τ, gewinnen wir das endgültige Ergebnis für den Phononenanteil bei Augerübergängen

$$\Gamma^{f}(T) = \frac{2\pi}{\hbar}\Big[\Big(e^{\sum_{t=1}^{d_f} f_{0,t}^{\pi\pi'}} \sum_{\mu_1 \cdots \mu_{d_f}} \prod_{t=1}^{d_f} \sigma_t^{\pi}(\mu_t, T, \alpha_t^{\pi\pi'}) \sum_{\nu_1 \cdots \nu_{d_f}} g_{\nu_1}^{\pi\pi'} \cdots g_{\nu_{d_f}}^{\pi'}\Big)$$
$$\Big(e^{\sum_{t=1}^{d_{xx}} f_{0,t}^{xx'}} \sum_{\bar{\mu}_1 \cdots \bar{\mu}_{d_{xx}}} \prod_{t=1}^{d_{xx}} \sigma_t^{xx'}(\bar{\mu}_t, T, \alpha_t^{xx'}) \sum_{\bar{\nu}_1 \cdots \bar{\nu}_{d_{xx}}} g_{\bar{\nu}_1}^{xx'} \cdots g_{\nu_{d_{xx}}}^{xx'}\Big) \qquad (5.26)$$
$$\delta_f\Big(\Big[\Delta E_{\pi\pi'} - \sum_{t=1}^{d_f} \hbar(\mu_t - \nu_t)\omega_t^{\pi'}\Big] + \Big[\Delta E_{xx'} - \sum_{t=1}^{d_{xx}} \hbar(\bar{\mu}_t - \bar{\nu}_t)\,\omega_t^{xx'}\Big]\Big)\Big] .$$

Mit diesem Ergebnis (5.36) und (5.12) haben wir einen berechenbaren Ausdruck für phonon-assistierte Augerübergänge gefunden. Dazu müssen wir die in diesen Ausdruck eingehenden Parameter des jeweiligen Kristalls kennen. Diese sind: Frequenzen der Störschwingungen, die Normalkoordinatenverschiebungen bzw. den Huang-Rhys-Faktor, die elektronischen Energiedifferenzen und die dazugehörigen statischen und dynamischen Wellenfunktionen. Bei Kenntnis dieser aufgezählten Parameter anderer Kristalle kann unser Ergebnis auf andere Halbleitermodelle übertragen werden. Dazu sind aber vorher genauere Untersuchungen notwendig.

In dieser Arbeit wenden wir (5.36) auf einen Halogenidkristall mit Farbzentren an. In Übereinstimmung mit (5.3) nehmen wir keine Frequenzverschiebung der angekoppelten Normalschwingungen an. Damit läßt sich die Anzahl der angekoppelten Normalschwingungen auf eine effektive Schwingung reduzieren, so daß aus (5.36) wird:

$$\Gamma^{f}(T) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mu} \sum_{\bar{\mu}} \sigma^{\pi\pi'}(\mu, T, \alpha^{\pi\pi'})\, \sigma^{xx'}(\bar{\mu}, T, \alpha^{xx'})\, \delta_f\big(\Delta U_{mm'}^{ss'} - (\mu+\bar{\mu})\hbar\omega^{\circ}\big) \qquad (5.37)$$

Die gesamte Übergangswahrscheinlichkeit für Augerprozesse schreibt sich somit

$$W_{mm'}^{A}(T) = \frac{2\pi}{\hbar} \hat{A}\hat{A}^{*}\Big[e^{a^{\pi\pi'}[(\bar{r}-\bar{s}')+(\bar{r}^{*}-\bar{s}'^{*})]+a^{xx'}[(\bar{\bar{r}}-\bar{\bar{s}}')+(\bar{\bar{r}}^{*}-\bar{\bar{s}}'^{*})]} \cdot$$
$$\sum_{\mu,\bar{\mu}} \sigma^{\pi\pi'}(\mu, T, \alpha^{\pi\pi'})\, \sigma^{xx'}(\bar{\mu}, T, \alpha^{xx'})\, \delta_f\big(\Delta U_{mm'}^{ss'} - (\mu+\bar{\mu})\hbar\omega^{\circ}\big)\Big]_{0} \qquad (5.38)$$

Als letzte eingeführte Einschränkung berücksichtigen wir bei der Auswertung die statische Kopplung. Wir können dies wegen der rein Coulomb'schen Wechselwirkung unserer Übergänge tun. Aus (5.38) wird in dieser Näherung schließlich

$$W^{\Lambda}_{mm'}(T) = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle \psi^{\circ}_{\gamma}(x)\,\psi^{\circ}_{\chi}(x')\left|e^2 C(x,x')\right|\psi^{\circ}_{\gamma'}(x)\,\psi^{\circ}_{\chi'}(x')\right\rangle - \left\langle \psi^{\circ}_{\gamma}(x)\,\psi^{\circ}_{\chi}(x')\left|e^2 C(x,x')\right|\psi^{\circ}_{\gamma'}(x')\psi^{\circ}_{\chi'}(x)\right\rangle\right|^2$$

$$\sum_{\mu,\bar{\mu}} \sigma^{\pi\pi'}(\mu, T, \alpha^{\pi\pi'})\, \sigma^{\pi\pi'}(\bar{\mu}, T, \alpha^{\pi\pi'})\, \delta_{\gamma}\left(\Delta U^{st}_{mm'} - (\mu+\bar{\mu})\hbar\omega^{\circ}\right) \tag{5.39}$$

${}^{\circ}\sigma^{i}(\mu, T, \alpha^{i})$ entsteht aus $\sigma^{i}(\mu, T, \alpha^{i})$ durch Nullsetzen der Parameter γ und γ^{*}.

6. Reaktionskinetik für Augerprozesse in Ionenkristallen mit Farbzentren

Unsere weiteren Untersuchungen müssen sich nun an einem definierten Modell konkretisieren, um letzten Endes auch numerische (mit dem Experiment vergleichbare) Aussagen machen zu können. Wie bereits öfter angedeutet, nehmen wir als Modell einen Ionenkristall mit Farbzentren. Selbstverständlich könnten auch andere Halbleitermodelle studiert werden. Uns ist aber daran gelegen, an einem einfachen Beispiel die gesamten Überlegungen, angefangen von der Schrödingergleichung des Gesamtsystems bis hin zu meßbaren Größen des Systems, exemplarisch durchzuziehen.

Wie bereits am Anfang von Abschnitt 3 beschrieben, legen wir unseren Untersuchungen einen idealisierten Mosaikblock mit s Anionenlücken zugrunde, die mit zusätzlichen s Störelektronen F-, F'- und α -Zentren und damit auch Leitungsbandzustände [1] bilden. Hier sei nochmals erwähnt, daß wir bei unseren Rechnungen nur solche Energieänderungen annehmen, die erheblich geringer als die Energiedifferenz zwischen Valenz- und Leitungsband sind. Aus diesem Grunde müssen also nur Energieaustauschprozesse zwischen den oben beschriebenen Störzuständen und Leitungsbandzuständen betrachtet werden. Der Elektronenzustand (3.5) des Mosaikblocks schreibt sich mit diesen Voraussetzungen und der Annahme, daß

k Elektronen im F-Zentrum Grundzustand an den Orten $\lambda_1 \dots \lambda_k$,

l Elektronen im F* -Zentrum an den Orten $\mu_1 \dots \mu_l$,

2 m Elektronen im F'-Zentrum an den Plätzen $\nu_1 \dots \nu_m$,

n Elektronen im Leitungsband mit den Quasiimpulsen $k_1 \dots k_n$

und damit

(n + m) elektronenfreie α -Zentren an den Orten $\varrho_1, \dots, \varrho_{n+m}$

---

[1] Als Leitungsbandzustände werden in erster Linie Polaronenfunktionen verstanden, auch wenn aus reiner Unkenntnis solcher in späteren Rechnungen Blochfunktionen dafür verwendet werden.

im Mosaikblock vorhanden sind:

$$|\chi_n^c\rangle = (N+S)!^{-\frac{1}{2}} \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_{N+S}} (-1)^P \left[\psi_F(\lambda_1) \dots \psi_F(\lambda_K) \psi_{F'}(\mu_1) \dots \psi_{F'}(\mu_L) \psi_{F''}(\nu_1) \dots \psi_{F''}(\nu_M) \cdot \right. \tag{6.1}$$

$$\left. \cdot \psi_c(k_1) \dots \psi_c(k_n)\, a^n_{\alpha_{k_1} s_1} \dots a^n_{\alpha_{k_{N+m}} s_{N+m}} \right]$$

Dieser Elektronenzustand soll im weiteren durch

$$|n\rangle \equiv |\lambda_1 \dots \lambda_K \mu_1 \dots \mu_L \nu_1 \dots \nu_M s_1 \dots s_{N+m}\, k_1 \dots k_n\rangle \tag{6.2}$$

gekennzeichnet werden. Dies ist möglich, da die Atomfunktionen $a^n_{\alpha_{k_i} s_i}$ nach Voraussetzung (3.6) keiner Veränderung unterworfen sind.

Mit dieser Charakterisierung (6.2) aller möglichen Zustände im Mosaikblock lassen sich nun alle im Modell vorkommenden Übergänge darstellen. Die strahlenden und strahlungslosen Einteilchenübergänge wurden bereits von Stumpf /1/ beschrieben und bedürfen hier keiner weiteren Darstellung.

Von den in dieser Arbeit zu besprechenden Zweiteilchenübergängen, von denen 19 verschiedene Prozesse für dieses Modell existieren, sollen 8 Übergänge bei den weiteren Rechnungen betrachtet werden.

Wir listen diese Prozesse tabellarisch auf, wobei wir für jeden einzelnen den Zustand (6.2) als Endzustand annehmen.

I. Auger-Rekombination

(1) Übergang: $c \longrightarrow F$ mit $\psi_c(k'_{n+1}) \longrightarrow \psi_F(\lambda_K)$

$c \longrightarrow c$ mit $\psi_c(k'_i) \longrightarrow \psi_c(k_i)$ (6.3)

Anfangskonfiguration:

$$|n'\rangle = |\lambda_1 \dots \lambda_{\alpha-1} \lambda_{\alpha+1} \dots \lambda_K \mu_1 \dots \mu_L \nu_1 \dots \nu_M s_1 \dots s_{N+m} s'_{N+m+1} \equiv \lambda_\alpha, k_1 \dots k_{i-1} k'_i k_{i+1} \dots k_n k'_{n+1}\rangle$$

wobei $1 \le \alpha \le K$

$1 \le i \le n$

$k'_i, k'_{n+1} \in \{k_1 \dots k_n\}$

Übergangswahrscheinlichkeit:

$$W^{AR}_{k_i' k_{n+1}' k_i}\left(s'_{n+m+1} \,\|\, F, c\right)$$

(2) Übergang: $c \longrightarrow F^*$ mit $\Psi_c(k'_{n+1}) \longrightarrow \Psi_{F^*}(\mu_\alpha)$
$c \longrightarrow c$ mit $\Psi_c(k_i') \longrightarrow \Psi_c(k_i)$ (6.4)

Anfangskonfiguration:

$$|n'\rangle = |\lambda_1 \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_{\alpha-1} \mu_{\alpha+1} \dots \mu_\ell \nu_1 \dots \nu_m s_1 \dots s_{n+m} s'_{n+m+1} \equiv \mu_\alpha, k_1 \dots k_{i-1} k_i' k_{i+1} \dots k_n k'_{n+1}\rangle$$

wobei $1 \le \alpha \le \ell$
$1 \le i \le n$
$k_i', k'_{n+1} \in \{k + k_1 \dots k_n\}$

Übergangswahrscheinlichkeit:

$$W^{AR}_{k_i' k_{n+1}' k_i}\left(s'_{n+m+1} \,\|\, F^*, c\right)$$

(3) Übergang: $c \longrightarrow F'$ mit $\Psi_c(k'_{n+1}) \longrightarrow \Psi_{F'}(\nu_\beta)$
$c \longrightarrow c$ mit $\Psi_c(k_i') \longrightarrow \Psi_c(k_i)$ (6.5)

Anfangskonfiguration:

$$|n'\rangle = |\lambda_1 \dots \lambda_k \lambda'_{k+1} \equiv \nu_\beta, \mu_1 \dots \mu_\ell \nu_1 \dots \nu_{\beta-1} \nu_{\beta+1} \dots \nu_m s_1 \dots s_{n+m} k_1 \dots k_{i-1} k_i' k_{i+1} \dots k_n k'_{n+1}\rangle$$

wobei $1 \le \beta \le m$
$1 \le i \le n$
$k_i', k'_{n+1} \in \{k + k_1 \dots k_n\}$

Übergangswahrscheinlichkeit:

$$W^{AR}_{k_i', k'_{n+1}, k_i}\left(\lambda'_{k+1} \,\|\, F', c\right)$$

II. "Stoß-Ionisations-Prozesse"

(4) Übergang: $F \longrightarrow C$ mit $\Psi_F(\lambda'_{k+m}) \longrightarrow \Psi_C(k_j)$
$c \longrightarrow c$ mit $\Psi_c(k'_i) \longrightarrow \Psi_c(k_i)$ (6.6)

Anfangskonfiguration:

$$|\eta'\rangle = |\lambda_1 \dots \lambda_k \lambda'_{k+m} \equiv \varsigma_\alpha \mu_1 \dots \mu_\ell \nu_1 \dots \nu_m \varsigma_1 \dots \varsigma_{\alpha-1} \varsigma_{\alpha+1} \dots \varsigma_{n+m} k_1 \dots k_{i-1} k'_i k_{i+1} \dots k_{j-1} k_{j+1} \dots k_n\rangle$$

wobei $1 \le \alpha \le n+m$
$k'_i \in \{k+ k_1 \dots k_n\}$
$1 \le i,j \le n \quad i \neq j$

Übergangswahrscheinlichkeit:

$$W^{SI}_{k'_i k_j k_i} \left(\lambda'_{k+m} \mid c, F\right)$$

(5) Übergang: $F^* \longrightarrow C$ mit $\Psi_{F^*}(\mu'_{\ell+1}) \longrightarrow \Psi_c(k_j)$
$c \longrightarrow c$ mit $\Psi_c(k'_i) \longrightarrow \Psi_c(k_i)$ (6.7)

Anfangskonfiguration:

$$|\eta'\rangle = |\lambda_1 \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_\ell \mu'_{\ell+1} \equiv \varsigma_\alpha \nu_1 \dots \nu_m \varsigma_1 \dots \varsigma_{\alpha-1} \varsigma_{\alpha+1} \dots \varsigma_{n+m}, k_1 \dots k_{i-1} k'_i k_{i+1} \dots k_{j-1} k_{j+1} \dots k_n\rangle$$

wobei $1 \le \alpha \le n+m$
$k'_i \in \{k+ k_1 \dots k_n\}$
$1 \le i,j \le n \quad i \neq j$

Übergangswahrscheinlichkeit:

$$W^{SI}_{k'_i k_i k_j} \left(\mu'_{\ell+1} \parallel c, F^*\right)$$

(6) Übergang: $F' \longrightarrow C$ mit $\Psi_{F'}(\nu'_{m+1}) \longrightarrow \Psi_c(k_j)$
$c \longrightarrow c$ mit $\Psi_c(k'_i) \longrightarrow \Psi_c(k_i)$ (6.8)

Anfangskonfiguration:

$$|n'\rangle = |\lambda_1 \dots \lambda_{\alpha-1}\lambda_{\alpha+1} \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_\ell \nu_1 \dots \nu_m \nu'_{m+1} \equiv \lambda_\alpha \varrho_1 \dots \varrho_{n+m}\ k_1 \dots k_{i-1}\ k'_i\ k_{i+1} \dots k_{j-1} k_{j+1} \dots k_n\rangle$$

$1 \le \alpha \le k$
$k'_i \in \{k \in k_1 \dots k_n\}$
$1 \le i,j \le n \quad i \ne j$

Übergangswahrscheinlichkeit:

$$W^{SI}_{k'_i k_i k_j}\left(\nu'_{m+1} \,\|\, c_1 F'\right)$$

III. Auger-Prozesse

(7) Übergang: $F^* \longrightarrow F$ mit $\psi_{F^*}(\mu'_{\ell+1}) \longrightarrow \psi_F(\lambda_\alpha)$
$F^* \longrightarrow c$ mit $\psi_{F^*}(\mu'_{\ell+2}) \longrightarrow \psi_c(k_i)$ (6.9)

Anfangskonfiguration:

$$|n'\rangle = |\lambda_1 \dots \lambda_{\alpha-1}\lambda_{\alpha+1} \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_\ell \mu'_{\ell+1} \equiv \lambda_\alpha \mu'_{\ell+2} \equiv \varrho_\beta \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{\beta-1}\varrho_{\beta+1} \dots \varrho_{n+m}\ k_1 \dots k_{i-1} k_{i+1} \dots k_n\rangle$$

wobei $1 \le \alpha \le k$
$1 \le i \le n$
$1 \le \beta \le n+m$

Übergangswahrscheinlichkeit:

$$W^{A}_{k_i}\left(\mu'_{\ell+1}\,\mu'_{\ell+2} \,\|\, F_1 F^*/c_1 F^*\right)$$

(8) Übergang: $F^* \longrightarrow F$ mit $\psi_{F^*}(\mu'_{\ell+1}) \longrightarrow \psi_F(\lambda_\alpha)$
$F' \longrightarrow c$ mit $\psi_{F'}(\nu'_{m+1}) \longrightarrow \psi_c(k_i)$ (6.10)

Anfangskonfiguration:

$$|n'\rangle = |\lambda_1 \dots \lambda_{\alpha-1}\lambda_{\alpha+1} \dots \lambda_{\beta-1}\lambda_{\beta+1} \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_\ell \mu'_{\ell+1} \equiv \lambda_\alpha \nu_1 \dots \nu_m \nu'_{m+1} \equiv \varrho_\beta \varrho_1 \dots \varrho_{n+m}\ k_1 \dots k_{i-1} k_{i+1} \dots k_n\rangle$$

wobei $1 \le \alpha,\beta \le k \quad \alpha \ne \beta$
$1 \le i \le n$

Übergangswahrscheinlichkeit:

$$W^{A}_{\ell_i}\left(\mu'_{\ell+1}\,\nu'_{n+1} \,\|\, F, F^{*}/c, F'\right)$$

Um nun "rate equations" für die mittleren Besetzungszahlen der F-, F*-, F'- und Leitungsbandzustände abzuleiten, an denen neben den Einteilchenübergängen /1,27/ die oben angeführten Augerprozesse teilnehmen, verwenden wir die in Abschnitt 3 angegebene Elektronen-Reaktionsgleichung (3.22). Nach dieser Gleichung sind Übergangsraten verschiedener Prozesse additiv untereinander gekoppelt. Daher können die für strahlende und strahlungslose Einteilchenübergänge entwickelten Terme in /1,27/ am Ende unserer Ableitungen einfach addiert werden. Wir beschränken uns hier auf die Auger-Reaktionskinetik. Wegen der Ähnlichkeit der Ableitung der insgesamt 19 Reaktionsterme begnügen wir uns mit den 8 oben angegebenen Prozessen. Am Ende geben wir das Ergebnis aller 19 Übergänge an.

Wegen der Wahrscheinlichkeitserhaltung in der irreversiblen Pauli-Master-Dynamik läßt sich (3.22) auch schreiben:

$$\dot{p}_n = \sum_{n'}{}' \left[W^{k}_{nn'} + W^{s}_{nn'}\right] p_{n'} + \left[W^{k}_{nn} + W^{s}_{nn}\right] p_n \,. \tag{6.11}$$

Nach (6.11) müssen wir alle möglichen Anfangszustände summieren, die in den Endzustand (6.2) übergehen. Diese Anfangszustände sind aber bereits in (6.3) - (6.10) angegeben. Bezeichnen wir die Besetzungswahrscheinlichkeit p_n des Zustandes $|n\rangle =$
$= |\alpha_1 \ldots \lambda_k \mu_1 \ldots \mu_\ell \nu_1 \ldots \nu_m \varrho_1 \ldots \varrho_{n-m} k_1 \ldots k_n\rangle$ mit

$$p_n \equiv \rho^{k_1 \ldots k_n}_{\alpha_1 \ldots \lambda_k \mu_1 \ldots \mu_\ell \nu_1 \ldots \nu_m \varrho_1 \ldots \varrho_{n-m}} \tag{6.12}$$

schreibt sich (3.22) folgendermaßen:

(6.13)

$$\dot{p}^{k_1 \dots k_n}_{\alpha_1 \dots \alpha_k \mu_1 \dots \mu_l \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{n+m}} =$$

$$\sum_{\alpha=1}^{k} \sum_{\varrho'} \sum_{k_i' k''}^{\neq 1} \sum_{i=1}^{n} W^{AR}_{k' k'' k_i}(\varrho' \| F_i c)\, \delta_{\alpha_\alpha \varrho'}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_n k''}_{\alpha_1 \dots \alpha_{\alpha-1} \alpha_{\alpha+1} \dots \alpha_k \mu_1 \dots \mu_l \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{n+m} \varrho'} \quad 1)$$

$$+ \sum_{\alpha=1}^{l} \sum_{\varrho'} \sum_{k_i' k''}^{\neq 1} \sum_{i=1}^{n} W^{AR}_{k' k'' k_i}(\varrho' \| F_i^* c)\, \delta_{\mu_\alpha \varrho'}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_n k''}_{\alpha_1 \dots \alpha_k \mu_1 \dots \mu_{\alpha-1} \mu_{\alpha+1} \dots \mu_l \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{n+m} \varrho'}$$

$$+ \sum_{\alpha=1}^{m} \sum_{\lambda'} \sum_{k_i' k''}^{\neq 1} \sum_{i=1}^{n} W^{AR}_{k' k'' k_i}(\lambda' \| F_i' c)\, \delta_{\nu_\alpha \lambda'}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_n k''}_{\alpha_1 \dots \alpha_k \mu_1 \dots \mu_l \nu_1 \dots \nu_{\alpha-1} \nu_{\alpha+1} \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{n+m}}$$

$$+ \sum_{\alpha=1}^{n+m} \sum_{\lambda'} \sum_{k'}^{+} \sum_{i,j=1}^{n}{}' W^{SI}_{k' k_i k_j}(\lambda' \| c_i \bar{F})\, \delta_{\varrho_\alpha \lambda'}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_{j-1} k_{j+1} \dots k_n}_{\alpha_1 \dots \alpha_k \mu_1 \dots \mu_l \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{\alpha-1} \varrho_{\alpha+1} \dots \varrho_{n+m}}$$

$$+ \sum_{\alpha=1}^{n+m} \sum_{\mu'} \sum_{k'}^{+} \sum_{i,j=1}^{n}{}' W^{SI}_{k' k_i k_j}(\mu' \| c_i F^*)\, \delta_{\mu' \varrho_\alpha}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_{i-1} k_{j+1} \dots k_n}_{\alpha_1 \dots \alpha_k \mu_1 \dots \mu_l \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{\alpha-1} \varrho_{\alpha+1} \dots \varrho_{n+m}}$$

$$+ \sum_{\alpha=1}^{k} \sum_{\nu'} \sum_{k'}^{+} \sum_{i,j=1}^{n}{}' W^{SI}_{k' k_i k_j}(\nu' \| c_i F')\, \delta_{\alpha_\alpha \nu'}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_{j-1} k_{j+1} \dots k_n}_{\alpha_1 \dots \alpha_{\alpha-1} \alpha_{\alpha+1} \dots \alpha_k \mu_1 \dots \mu_l \nu_1 \dots \nu_{\alpha-1} \nu' \varrho_1 \dots \varrho_{n+m}}$$

$$+ \sum_{\alpha=1}^{k} \sum_{\beta=1}^{n+m} \sum_{\mu' \mu''}{}' \sum_{i=1}^{n} W^{A}_{k_i}(\mu' \mu'' \| F_i F' F'' / c_i F'')\, \delta_{\alpha_\alpha \mu'}\, \delta_{\varrho_\beta \mu''}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k_{i+1} \dots k_n}_{\alpha_1 \dots \alpha_{\alpha-1} \alpha_{\alpha+1} \dots \alpha_k \mu_1 \dots \mu_{\alpha-1} \mu_{\alpha+1} \dots \mu_l \mu' \mu'' \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{\beta-1} \varrho_{\beta+1} \dots \varrho_{n+m}}$$

$$+ \sum_{\alpha,\beta=1}^{k,l} \sum_{\mu'} \sum_{\nu'} \sum_{i=1}^{n} W^{A}_{k_i}(\mu' \nu' \| F_i F' F'' / c_i F'')\, \delta_{\alpha_\alpha \mu'}\, \delta_{\mu_\beta \nu'}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k_{i+1} \dots k_n}_{\alpha_1 \dots \alpha_{\alpha-1} \alpha_{\alpha+1} \dots \alpha_k \mu_1 \dots \mu_{\beta-1} \mu_{\beta+1} \dots \mu_l \mu' \nu' \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{n+m}}$$

$$+ W^{A}_{nn}\, p_n$$

---

1) Die Summe $\sum_{k}^{\neq}$ hat die Bedeutung $\sum_{k+k_1 \dots k_n}$ und $\sum_{a,b}'$ entspricht $\sum_{a} \sum_{b \neq a}$.

Um die Summen in (6.13) auswerten zu können, entwickeln wir (6.12) nach Ortsverteilungsdichten:

$$p^{k_1 \dots k_m}_{\lambda_1 \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_\ell \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{n+m}} = \sum_{\varkappa=0}^{\infty} {}^{\varkappa}p^{k_1 \dots k_m}_{k,\ell,m,m+n}\, g^{\varkappa}_{\lambda_1 \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_\ell \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{n+m}} \,. \tag{6.1}$$

In dieser Darstellung enthalten die Größen $g^{\varkappa}_{\lambda_1 \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_\ell \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{n+m}}$ die volle Information der Störstellenorte im Mosaikblock.

Falls man für die Orte der Störzentren folgende Abkürzung einführt

$$\Delta := (k, \ell, m, m+n) \tag{6.1}$$

$$t(\Delta) := \lambda_1 \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_\ell \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{n+m} \,,$$

läßt sich (6.14) kürzer schreiben:

$$p^{k_1 \dots k_m}_{t(\Delta)} = \sum_{\varkappa=1}^{\infty} {}^{\varkappa}p_{\Delta}\, g^{\varkappa}_{t(\Delta)} \tag{6.1}$$

Selbstverständlich kann gezeigt werden, daß mit (6.11) die Ortsverteilungsdichten $g^{\varkappa}_{t(\Delta)}$ folgende Gleichung erfüllen müssen:

$$\dot{g}^{\varkappa}_{t(\Delta)} = \sum_{t'(\Delta')} \left[W^{\varkappa}_{t(\Delta),t'(\Delta')}\, g^{\varkappa}_{t'(\Delta')} - W^{\varkappa}_{t'(\Delta')t(\Delta)}\, g^{\varkappa}_{t(\Delta)} \right] \tag{6.1}$$

wobei die $W^{\varkappa}_{t(\Delta),t'(\Delta')}$ durch entsprechende Definitionen ebenfalls aus (6.11) hervorgehen. Da wir auf die genauen Lösungen dieser Gleichung im einzelnen nicht eingehen wollen, werden sie hier nicht angegeben.

Prinzipiell kann aus (6.17) die volle Information über die Orte der Zentren gewonnen werden, wenn man eine entsprechende Anfangskonfiguration vorgibt. Da dies nicht im vollen Umfang möglich ist, nehmen wir hier an, daß die vorhandenen Störzentren einer Gleichverteilung im Kristall unterliegen. Diese Gleichverteilung verwenden wir a priori als erstes Glied in der Entwicklung (6.14) bzw. (6.16). Dann stellen alle übrigen Terme Abweichungen von dieser räumlich statistischen Gleichverteilung $g^{0}_{t(\Delta)}$ dar. In dieser Approximation schreibt sich (6.14) ausführlich

$$p^{k_1 \dots k_n}_{\lambda_1 \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_l \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{n+m}} \equiv {}^{\circ}p^{k_1 \dots k_n}_{k\,l\,m\,m+n}\; g^{\circ}_{\lambda_1 \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_l \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{n+m}} \tag{6.18}$$

Die Größen ${}^{\circ}p^{k_1 \dots k_n}_{k\,l\,m\,m+n}$ können als maximal reduzierte Marginalverteilungen der $p^{k_1 \dots k_n}_{\lambda_1 \dots \mu_1 \dots \nu_1 \dots \varrho_1 \dots}$ angesehen werden, die durch

$${}^{\circ}p^{k_1 \dots k_n}_{k\,l\,m\,m+n} := \sum_{t(\Delta)}{}^{+}\; p^{k_1 \dots k_n}_{\lambda_1 \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_l \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{n+m}} \quad {}^{1)} \tag{6.19}$$

definiert sind. Sie geben an, mit welcher Wahrscheinlichkeit K F-, l F^{*}-, m F'- und (m + n) α-Zentren im Mosaikblock vorhanden sind.

Zur Ableitung von rate equations für die mittleren Besetzungszahlen der verschiedenen Zustände müssen wir eine Spurbildung über den gesamten Raum vornehmen. Für die verschiedenen Zentren schreibt sich diese folgendermaßen:

---

1) Im weiteren bezeichnen wir ${}^{\circ}p$ mit p bzw. g° mit g.

$\sum_{t(\Delta)}{}^{+}$ hat die Bedeutung einer das Pauli-Prinzip einschliessenden Summe über alle s Anionenlücken.

(a) F-Zentrum:

$$
\begin{aligned}
n_F &:= Sp\left[\hat{S}\hat{K}\right] \qquad (6.20)\\
&= \sum_{klmn} {}^{P}\sum_{t(\Delta)} {}^{K}\sum_{k_1 \dots k_n} \delta_{s,k+l+2m+n} \left\langle \chi^c_n \middle| \hat{S}\hat{K} \middle| \chi^c_n \right\rangle \quad ^{1)}\\
&= \sum_{klmn} {}^{P}\sum_{t(\Delta)} {}^{K}\sum_{k_1 \dots k_n} k\, \delta_{s,k+l+2m+n}\; \rho^{k_1 \dots k_n}_{k\,l\,m\,m+n}\; g_{t(\Delta)}\\
&= \sum_{klmn} {}^{K}\sum_{k_1 \dots k_n} k\, \delta_{s,k+l+2m+n} \frac{s!}{k!\,l!\,m!\,(m+n)!}\; \rho^{k_1 \dots k_n}_{k\,l\,m\,m+n}\\
&= \sum_{klmn} {}^{K}\sum_{k_1 \dots k_n} k\, \delta_{s,k+l+2m+n}\; \tilde{\rho}^{k_1 \dots k_n}_{k\,l\,m\,m+n}\\
&= \sum_{klmn} k\, \delta_{s,k+l+2m+n}\; \tilde{\rho}_{k\,l\,m\,m+n}
\end{aligned}
$$

mit den Abkürzungen:

$$
\tilde{\rho}^{k_1 \dots k_n}_{k\,l\,m\,m+n} := \frac{s!}{k!\,l!\,m!\,(m+n)!}\; \rho^{k_1 \dots k_n}_{k\,l\,m\,m+n} \qquad (6.21)
$$

$$
\tilde{\rho}_{k\,l\,m\,m+n} := {}^{K}\sum_{k_1 \dots k_n} \rho^{k_1 \dots k_n}_{k\,l\,m\,n} \qquad (6.22)
$$

Wie in (6.20) ausgedrückt, setzt sich die Spurbildung aus verschiedenen Beiträgen zusammen:

---

1) $\hat{K}$ Besetzungszahloperator der F-Zentren;

$\hat{S}$ statistischer Operator des Elektronensystems.

(α) $\sum^{P}_{\pi(\Delta)}$ ist eine Summe über alle möglichen Permutationen der k F-, l F^{*} -, m F'- und (m+n) α -Zentren über insgesamt s Anionenlücken. Davon gibt es $\frac{s!}{k!\,l!\,m!\,(m+n)!}$ Möglichkeiten. Mit der Normierung

$$\sum^{\neq}_{\lambda_1 \ldots \lambda_k \mu_1 \ldots \mu_l \nu_1 \ldots \nu_m \varrho_1 \ldots \varrho_{n+m}} g_{\lambda_1 \ldots \lambda_k \mu_1 \ldots \mu_l \nu_1 \ldots \nu_m \varrho_1 \ldots \varrho_{n+m}} = 1 \qquad (6.23)$$

tritt der oben angegebene Faktor bei der Spurbildung auf.

(β) $\sum^{K}_{k_1 \ldots k_n}$ beinhaltet die Spurbildung im Leitungsband. Sie wird durch eine Kombinationssumme über die Energiezustände gegeben, um dem Pauli-Prinzip Rechnung zu tragen.

(γ) Durch $\sum_{klmn} \delta_{s,\,k+l+2m+n}$ wird über die möglichen Anzahlen der verschiedenen Zentren summiert.

Analog sezten sich die übrigen mittleren Besetzungszahlen zusammen:

(b) F^{*} -Zentrum:

$$n_{F^*} := \sum_{klmn} l\, \delta_{s,\,k+l+2m+n}\, \tilde{\rho}_{k\,l\,m\,m+n} \qquad (6.24)$$

(c) F'-Zentrum:

$$n_{F'} := \sum_{klmn} m\, \delta_{s,\,k+l+2m+n}\, \tilde{\rho}_{k\,l\,m\,m+n} \qquad (6.25)$$

(d) Leitungsbandzustände:

$$n_{L} := \sum_{klmn} n\, \delta_{s,\,k+l+2m+n}\, \tilde{\rho}_{k\,l\,m\,m+n} \qquad (6.26)$$

Wir wenden nun die in (6.20) angegebene Teilspurbildung über die Störzentrenorte auf (6.13) an. Um eine Reduzierung der vielen

Ortsfreiheitsgrade zu erzielen, müssen wir zusätzlich die kombinatorische Formel

$$\overset{P}{\sum_{s_1 \cdots s_n}} \sum_{i=1}^{n} W_{s_i}\, p_{s_1 \cdots s_{i-1} s_{i+1} \cdots s_n} = \overset{P}{\sum_{s_1 \cdots s_{n-1}}} \sum_{s \neq s_1 \cdots s_{n-1}} W_s\, p_{s_1 \cdots s_{n-1}} \tag{6.27}$$

$$= \sum_{s} \overset{P}{\sum_{\substack{s_1 \cdots s_{n-1} \\ \neq s}}} W_s\, p_{s_1 \cdots s_{n-1}}$$

verwenden. Wir können mit dieser Beziehung die Permutationssumme direkt auf die Besetzungswahrscheinlichkeiten (6.18) anwenden. Mit den Definitionen

$$\tilde{g}_{s'} := \overset{P}{\sum_{\substack{\lambda_1 \cdots \lambda_{k-1} \mu_1 \cdots \mu_\ell \nu_1 \cdots \nu_m s_1 \cdots s_{n+m} \\ \neq s'}}} g_{\lambda_1 \cdots \lambda_{k-1} \mu_1 \cdots \mu_\ell \nu_1 \cdots \nu_m s_1 \cdots s_{n+m} s'} \tag{6.28}$$

$$\tilde{g}_{\lambda'} := \overset{P}{\sum_{\substack{\lambda_1 \cdots \lambda_k \mu_1 \cdots \mu_\ell \nu_1 \cdots \nu_{m-1} s_1 \cdots s_{n+m} \\ \neq \lambda'}}} g_{\lambda_1 \cdots \lambda_k \lambda' \mu_1 \cdots \mu_\ell \nu_1 \cdots \nu_{m-1} s_1 \cdots s_{n+m}} \tag{6.29}$$

$$\tilde{g}_{\mu'} := \overset{P}{\sum_{\substack{\lambda_1 \cdots \lambda_k \mu_1 \cdots \mu_\ell \nu_1 \cdots \nu_m s_1 \cdots s_{n+m-1} \\ \neq \mu'}}} g_{\lambda_1 \cdots \lambda_k \mu_1 \cdots \mu_\ell \mu' \nu_1 \cdots \nu_m s_1 \cdots s_{n+m-1}} \tag{6.30}$$

$$\tilde{g}_{\nu'} := \overset{P}{\sum_{\substack{\lambda_1 \cdots \lambda_{k-1} \mu_1 \cdots \mu_\ell \nu_1 \cdots \nu_m s_1 \cdots s_{n+m} \\ \neq \nu'}}} g_{\lambda_1 \cdots \lambda_{k-1} \mu_1 \cdots \mu_\ell \nu_1 \cdots \nu_m \nu' s_1 \cdots s_{n+m}} \tag{6.31}$$

$$\tilde{g}_{\mu'\mu''} := \overset{P}{\sum_{\substack{\lambda_1 \cdots \lambda_{k-1} \mu_1 \cdots \mu_\ell \nu_1 \cdots \nu_m s_1 \cdots s_{n+m-1} \\ \neq \mu', \mu''}}} g_{\lambda_1 \cdots \lambda_{k-1} \mu_1 \cdots \mu_\ell \mu' \mu'' \nu_1 \cdots \nu_m s_1 \cdots s_{n+m-1}} \tag{6.32}$$

$$\tilde{g}_{\mu'\nu'} := \overset{P}{\sum_{\substack{\lambda_1 \cdots \lambda_{k-1} \mu_1 \cdots \mu_\ell \nu_1 \cdots \nu_m s_1 \cdots s_{n+m-1} \\ \neq \mu', \nu'}}} g_{\lambda_1 \cdots \lambda_{k-1} \mu_1 \cdots \mu_\ell \mu' \nu_1 \cdots \nu_m \nu' s_1 \cdots s_{n+m-1}} \tag{6.33}$$

reduziert sich (6.13) unter Beachtung von (6.18), (6.20), (6.21) und (6.27) wesentlich auf

$$
\begin{aligned}
\dot{\tilde{p}}^{k_1 \dots k_n}_{k l m m+n} = & \sum_{k' k''}^{+1} \sum_{i=1}^{n} \sum_{s'} W^{AR}_{k' k'' k_i}(s' \| F_i c)\, \tilde{g}_{s'}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_n k''}_{k-1, l, m, m+n+1} \\
& + \sum_{k' k''}^{+1} \sum_{i=1}^{n} \sum_{s'} W^{AR}_{k' k'' k_i}(s' \| F_i^* c)\, \tilde{g}_{s'}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_n k''}_{k, l-1, m, m+n+1} \\
& + \sum_{k' k''}^{+1} \sum_{i=1}^{n} \sum_{\lambda'} W^{AR}_{k' k'' k_i}(\lambda' \| F_i' c)\, \tilde{g}_{\lambda'}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_n k''}_{k+1, l, m-1, m+n} \\
& + \sum_{k'}^{+} \sum_{i,j=1}^{n}{}' \sum_{\mu'} W^{SI}_{k' k_i k_j}(\mu' \| c, F^*)\, \tilde{g}_{\mu'}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_{j-1} k_{j+1} \dots k_n}_{k, l+1, m, m+n-1} \\
& + \sum_{k'}^{+} \sum_{i,j=1}^{n}{}' \sum_{\lambda'} W^{SI}_{k' k_i k_j}(\lambda' \| c, F) \tilde{g}_{\lambda'}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_{j-1} k_{j+1} \dots k_n}_{k+1, l, m, m+n-1} \\
& + \sum_{k'}^{+} \sum_{i,j=1}^{n}{}' \sum_{\nu'} W^{SI}_{k' k_i k_j}(\nu' \| c, F') \tilde{g}_{\nu'}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_{j-1} k_{j+1} \dots k_n}_{k-1, l, m+1, m+n} \\
& + \sum_{i=1}^{n} \sum_{\mu' \mu''} W^{A}_{k_i}(\mu' \mu'' \| F, F^* / c, F^*)\, \tilde{g}_{\mu' \mu''}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k_{i+1} \dots k_n}_{k-1, l+2, m, m+n+1} \\
& + \sum_{i=1}^{n} \sum_{\mu' \nu'} W^{A}_{k_i}(\mu' \nu' \| F, F^* / c, F^*)\, \tilde{g}_{\mu' \nu'}\, p^{k_1 \dots k_{i-1} k_{i+1} \dots k_n}_{k-2, l+1, m+1, m+n} \\
& + W_{nn}\, p^{k_1 \dots k_n}_{k, l, m, m+n}
\end{aligned}
\tag{6.34}
$$

Ohne weiteres könnten wir in diesem Stadium der Ableitung ortsunabhängige Übergangswahrscheinlichkeiten definieren. Das wäre aber mit den geschlängelten Verteilungen $\tilde{g}$ nicht von Vorteil, da sie nicht auf 1 normiert sind. Nach deren Normierung gewinnen wir dann über die Orte gewichtete Übergangswahrscheinlichkeiten. An (6.32) führen wir die Berechnung des Normierungsfaktors exemplarisch durch:

$$\sum_{\mu',\mu''} \tilde{g}_{\mu'\mu''} = \sum_{\mu'\mu''} {}' \sum_{\substack{\lambda_1 \dots \lambda_{k-1} \mu_1 \dots \mu_\ell \nu_1 \dots \nu_m \rho_1 \dots \rho_{m+n-1} \\ \neq \mu',\mu''}} g_{\lambda_1 \dots \lambda_{k-1} \mu_1 \dots \mu_\ell \mu' \mu'' \nu_1 \dots \nu_m \rho_1 \dots \rho_{m+n-1}}$$

$$= s(s-1) \frac{(s-2)!}{(k-1)!\,\ell!\,m!\,(m+n-1)!} = \frac{s!}{(k-1)\,\ell!\,m!(m+n-1)!} \tag{6.35}$$

Definieren wir somit

$$g(\rho') := \frac{(k-1)!\,\ell!\,m!\,(m+n)!}{s!}\,\tilde{g}_{\rho'} \tag{6.36}$$

$$\begin{aligned} g(\nu') &:= \frac{(k-1)!\,\ell!\,m!\,(m+n)!}{s!}\,\tilde{g}_{\nu'} \\ g(\lambda') &:= \frac{k!\,\ell!\,(m-1)!\,(m+n)!}{s!}\,\tilde{g}_{\lambda'} \\ g(\mu') &:= \frac{k!\,\ell!\,m!\,(m+n-1)!}{s!}\,\tilde{g}_{\mu'} \end{aligned} \tag{6.37}$$

$$g(\mu',\mu'') := \frac{(k-1)!\,\ell!\,m!\,(m+n-1)!}{s!}\,\tilde{g}_{\mu'\mu''} \tag{6.38}$$

$$g(\mu',\nu') := \frac{(k-1)!\,\ell!\,m!\,(m+n-1)!}{s!}\,\tilde{g}_{\mu'\nu'} \tag{6.39}$$

und die neuen Übergangswahrscheinlichkeiten

$$W^{AR}_{k'k''k_i}\left(\begin{matrix}F\\F^*\\F'\end{matrix}, c\right) := \begin{cases} \sum_{\rho'} W^{AR}_{k'k''k_i}\left(\rho' \,\|\, \begin{matrix}F\\F^*\end{matrix}, c\right) g(\rho') \\ \sum_{\lambda'} W^{AR}_{k'k''k_i}\left(\lambda' \,\|\, F', c\right) g(\lambda') \end{cases} \tag{6.40}$$

$$W^{SI}_{k'k_ik_j}\left(c, \begin{matrix}F\\F^*\\F'\end{matrix}\right) := \sum_{\lambda',\mu',\nu'} W^{SI}_{k'k_ik_j}\left(\begin{matrix}\lambda'\\\mu'\\\nu'\end{matrix} \,\Big\|\, c, \begin{matrix}F\\F^*\\F'\end{matrix}\right) g\left(\begin{matrix}\lambda'\\\mu'\\\nu'\end{matrix}\right) \tag{6.41}$$

$$W^{A}_{k_i}(\bar{F}_1 F^{*}/c_1 F^{*}) := \sum_{\mu'/\mu''} W^{A}_{k_i}(\mu'\mu'' \| F_1 F^{*}/c_1 F^{*})\, g(\mu'\mu'') \tag{6.42}$$

$$W^{A}_{k_i}(\bar{F}_1 F^{*}/c_1 F') := \sum_{\mu'\nu'} W^{A}_{k_i}(\mu'\nu' \| F_1 F^{*}/c_1 F^{*})\, g(\mu'\nu') \tag{6.43}$$

erhalten wir aus (6.34), wenn wir die auf der rechten Seite stehenden Besetzungswahrscheinlichkeiten $p^{k_1 \dots}_{(k\pm),(\ell\pm),(m\pm),(m+n\pm)}$ auf die entsprechenden geschlängelten Größen nach (6.21) umrechnen:

$$\begin{aligned}
\tilde{p}^{k_1 \dots k_n}_{k\,\ell\,m\,m+n} = {} & (m+n+1) \sum_{k'_1 k''}^{*1} \sum_{i=1}^{n} W^{AR}_{k'_1 k''_1 k_i}(\bar{F}_1 c)\, \tilde{p}^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_n k''}_{k-1,\,\ell,\,m,\,m+n+1} \\
& + (m+n+1) \sum_{k'_1 k''}^{*1} \sum_{i=1}^{n} W^{AR}_{k'_1 k''_1 k_i}(\bar{F}^{*}_1 c)\, \tilde{p}^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_n k''}_{k,\,\ell-1,\,m,\,m+n+1} \\
& + (k+1) \sum_{k'_1 k''}^{*1} \sum_{i=1}^{n} W^{AR}_{k'_1 k''_1 k_i}(\bar{F}'_1 c)\, \tilde{p}^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_n k''}_{k+1,\,\ell,\,m-1,\,m+n} \\
& + (k+1) \sum_{k'}^{*} \sum_{i,j=1}^{n} W^{\Xi}_{k'_1 k_i k_j}(c_1 F)\, \tilde{p}^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_{j-1} k_{j+1} \dots k_n}_{k+1,\,\ell,\,m,\,m+n-1} \\
& + (\ell+1) \sum_{k'}^{*} \sum_{i,j=1}^{n} W^{\Xi}_{k'_1 k_i k_j}(c_1 F^{*})\, \tilde{p}^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_{j-1} k_{j+1} \dots k_n}_{k,\,\ell+1,\,m,\,m+n-1} \\
& + (m+1) \sum_{k'}^{*} \sum_{i,j=1}^{n} W^{\Sigma\Xi}_{k'_1 k_i k_j}(c_1 F') \tilde{p}^{k_1 \dots k_{i-1} k' k_{i+1} \dots k_{j-1} k_{j+1} \dots k_n}_{k-1,\,\ell,\,m+1,\,m+n} \\
& + (\ell+1)(\ell+2) \sum_{i=1}^{n} W^{A}_{k_i}(\bar{F}_1 F^{*}/c_1 F^{*})\, \tilde{p}^{k_1 \dots k_{i-1} k_{i+1} \dots k_n}_{k-1,\,\ell+2,\,m,\,m+n-1} \\
& + (\ell+1)(m+1) \sum_{i=1}^{n} W^{A}_{k_i}(\bar{F}_1 F^{*}/c_1 F') \tilde{p}^{k_1 \dots k_{i-1} k_{i+1} \dots k_n}_{k-2,\,\ell+1,\,m+1,\,m+n} \\
& + \text{Diagonalterm}
\end{aligned} \tag{6.44}$$

In einem weiteren Schritt müssen wir die Teilspurbildung im Leitungsband durchführen. Dazu nehmen wir eine "adiabatische" [1] Kopplung des Leitungsbandes an die Störzentrenvorgänge an, indem wir in einer ersten Näherung eine Produktdarstellung verwenden

$$\tilde{\rho}^{k_1 \dots k_n}_{k,l,m,m+n} = \tilde{\rho}_{k,l,m,n} \cdot f_{k_1 \dots k_n} , \qquad (6.45)$$ [1]

wobei die Verteilungsdichte der Leitungsbandzustände wiederum durch ein Produkt über die einzelnen Zustände gegeben sein sollen. Diese letzte Approximation sei dadurch gerechtfertigt, daß keine kollektiven Leitungsbandphänomene beschrieben werden sollen:

$$f_{k_1 \dots k_n} = \prod_{i=1}^{n} f(k_i) . \qquad (6.46)$$

Somit lassen sich über das Leitungsband gemittelte Wahrscheinlichkeiten angeben:

$$w^{AR}\left(n \,\|\, \substack{F \\ F^* \\ F'} , c\right) := {\sum_{k',k''}}' \sum_{k} W^{AR}_{k',k'',k}\left(\substack{F \\ F^* \\ F'} , c\right) f(k',n,\beta)\, f(k'',n,\beta) \qquad (6.47)$$

$$w^{SI}\left(n \,\|\, c, \substack{F \\ F^* \\ F'}\right) := \sum_{k'} {\sum_{k,\bar{k}}}' W^{SI}_{k',k,\bar{k}}\left(c, \substack{F \\ F^* \\ F'}\right) f(k',n,\beta) \qquad (6.48)$$

$$W^{A}\left(F, F^*/c, \substack{F^* \\ F'}\right) := \sum_{k} W^{A}_{k}\left(F, F^*/c, \substack{F^* \\ F'}\right) \qquad (6.49)$$

Zusammen mit der Teilspurbildung im Leitungsband berechnen wir den ausstehenden Diagonalterm in (6.44). Es gilt nach (6.11):

---

1) siehe Anhang A

$$\sum_{klmn} W^{A}_{nn}\,\tilde{\tilde{p}}_{klmn}\,\delta_{s,k+l+2m+n} = \frac{d}{dt}\Big\{\sum_{klmn}\tilde{\tilde{p}}_{klmn}\,\delta_{s,k+l+2m+n}\Big\} - \sum_{klmn}\Big\{W^{A}_{klmn,k'l'm'n'}\,\tilde{\tilde{p}}_{k'l'm'n'}\Big\}\delta_{s,k+l+2m+n} \qquad (6.50)$$

$$\approx -\sum_{klmn}\Big[W^{A}_{klmn,k''l''m''n''}\Big]\,\tilde{\tilde{p}}_{klmn}\,\delta_{s,k+l+2m+n}\ .$$

Bei der Berechnung des letzten Klammerausdrucks $[-/-]$ in (6.45) muß eine Transformation der "nichtdiagonalen" Besetzungswahrscheinlichkeiten auf "Diagonalform" $\tilde{\tilde{p}}_{k,l,m,n}$ gebracht werden. Dies erreichen wir durch Umindizierung und Vernachlässigung der Randterme. Als Ergebnis erhalten wir schließlich für (6.44):

$$\begin{aligned}
\dot{\tilde{\tilde{p}}}_{klmn} = {} & w^{AR}(n\,\|\,F,c)\,\big[(m+n+1)\,\tilde{\tilde{p}}_{k-1,l,m,n+1} - (m+n)\,\tilde{\tilde{p}}_{k,l,m,n}\big] \qquad (6.51)\\
& + w^{AR}(n\,\|\,F^{*},c)\big[(m+n+1)\,\tilde{\tilde{p}}_{k,l-1,m,n+1} - (m+n)\,\tilde{\tilde{p}}_{k,l,m,n}\big]\\
& + w^{AR}(n\,\|\,F',c)\,\big[(k+1)\,\tilde{\tilde{p}}_{k+1,l,m-1,n+1} - k\,\tilde{\tilde{p}}_{k,l,m,n}\big]\\
& + w^{SI}(n\,\|\,c,F)\,\big[(k+1)\,\tilde{\tilde{p}}_{k+1,l,m,n-1} - k\,\tilde{\tilde{p}}_{k,l,m,n}\big]\\
& + w^{SI}(n\,\|\,c,F^{*})\,\big[(l+1)\,\tilde{\tilde{p}}_{k,l+1,m,n-1} - l\,\tilde{\tilde{p}}_{k,l,m,n}\big]\\
& + w^{SI}(n\,\|\,c,F')\,\big[(m+1)\,\tilde{\tilde{p}}_{k-1,l,m+1,n-1} - m\,\tilde{\tilde{p}}_{k,l,m,n}\big]\\
& + W^{A}(F,F^{*}/c,F^{*})\,\big[(l+1)(l+2)\,\tilde{\tilde{p}}_{k-1,l+2,m,n-1} - l(l-1)\,\tilde{\tilde{p}}_{k,l,m,n}\big]\\
& + W^{A}(F,F^{*}/c,F')\,\big[(l+1)(m+1)\,\tilde{\tilde{p}}_{k-2,l+1,m+1,n-1} - lm\,\tilde{\tilde{p}}_{k,l,m,n}\big]
\end{aligned}$$

Um aus dieser Gleichung in einem letzten Schritt auf die in (6.20), (6.24), (6.25) und (6.26) definierten mittleren Besetzungszahlen zu kommen, bleibt uns, die Summe über die verschiedenen Störzentrenanzahlen, multipliziert mit der jeweiligen Störzentrenmenge, auszuführen. Dazu verwenden wir noch einmal die oben bereits beschriebene "Diagonalapproximation", die sicher zu rechtfertigenden Näherungen:

$$n_{F \pm 1} \approx n_F$$
$$n_{F^* \pm 1} \approx n_{F^*} \qquad (6.52)$$

und die Mittelwertapproximation.

Mit der mittleren Besetzungszahl der α-Zentren

$$n_\alpha := n_L + n_{F^1} \qquad (6.53)$$

schreiben sich die vier "rate equations" mit den acht hier angegebenen, im betrachteten System ablaufenden Prozesse:

$$\dot{n}_F = w^{AR}(n_L \| F,c)\, n_\alpha + w^{AR}(n_L \| F',c)\, n_F + W^A(F,F^*/c,F^*)\, n_{F^*}^2 \qquad (6.54)$$
$$+ 2\, W^A(F,F^*/c,F^1)\, n_F n_{F^1} - w^{SI}(n_L \| c,F)\, n_F + w^{SI}(n_L \| c,F^1)\, n_{F^1}$$

$$\dot{n}_{F^*} = w^{AR}(n_L \| F^*,c)\, n_\alpha - W^A(F,F^*/c,F^*)\, n_{F^*}^2 - w^{SI}(n_L \| c,F^*)\, n_{F^*}$$

$$\dot{n}_{F^1} = w^{AR}(n_L \| F',c)\, n_F - W^A(F,F^*/c,F^1)\, n_F n_{F^1} - w^{SI}(n_L \| c,F^1)\, n_{F^1}$$

$$\dot{n}_L = -w^{AR}(n_L \| F,c)\, n_\alpha - w^{AR}(n_L \| F^*,c)\, n_\alpha - w^{AR}(n_L \| F',c)\, n_F$$
$$+ W^A(F,F^*/c,F^*)\, n_{F^*}^2 + W^A(F,F^*/c,F^1)\, n_F n_{F^1} + w^{SI}(n_L \| c,F^*)\, n_{F^*}$$
$$+ w^{SI}(n_L \| c,F)\, n_F + w^{SI}(n_L \| c,F^1)\, n_{F^1}$$

Diese Gleichungen beschreiben die (eingeschränkte) Auger-Reaktionskinetik eines entarteten und nichtentarteten Halbleiters, da wir noch keine weiteren Annahmen über das Leitungsband gemacht haben.

Tun wir dies aber für den Fall des vollständig nichtentarteten Halbleiters, können wir die in (6.42) - (6.44) definierten Übergangswahrscheinlichkeiten nach Anhang A weiter vereinfachen:

$$w^{AR}(n_L \| \vec{r}, \vec{r}', \vec{r}', c) = n_L^2 \sum_{k_1', k''}{}' \sum_{k} W^{AR}_{k'k''k} \left(\vec{r}, \vec{r}', \vec{r}', c\right) \frac{e^{-\beta \frac{\hbar^2 (k'^2 + k''^2)}{2m^*}}}{n_0^2} \tag{6.55}$$

$$=: n_L^2 \, W^{AR}\left(\vec{r}, \vec{r}', \vec{r}', c\right)$$

$$w^{SI}(n \| c_1 \vec{r}, \vec{r}', \vec{r}') = n_L \sum_{k'} \sum_{k_1, \vec{k}} W^{SI}_{k'k\vec{k}} (c_1 \vec{r}, \vec{r}', \vec{r}') \frac{e^{-\beta \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*}}}{n_0} \tag{6.56}$$

$$=: n_L \, W^{SI}(c_1 \vec{r}, \vec{r}', \vec{r}').$$

Ersetzen wir abschließend die durch (6.55) und (6.56) ausgedrückten Beziehungen in (6.54), erhalten wir als Resultat ein nichtlineares Reaktionssystem, in dem (in unserem Fall) bimolekulare und trimolekulare Reaktionsterme auftreten. Bevor wir diese aber angeben, soll unser System durch die Einteilchen-Übergänge /1,27/ und alle weiteren (in diesem Abschnitt nicht aufgelisteten) Zweiteilchenprozesse erweitert werden. Ohne im einzelnen auf die vorkommenden Übergangswahrscheinlichkeiten näher einzugehen, geben wir das Endergebnis unserer Reaktionskinetik an:

(6.57)

$$\dot{n}_F = W(F_1F^*)\,n_{F^*} - W(F_1^*F)\,n_F - W(F_1',C)\,n_F n_L + W(C_1F')\,n_{F'} + W^{AR}(F_1C)\,n_L^2 n_\alpha$$
$$- W^{AR}(F_1'C)\,n_L^2 n_F + W^A(F_1F^*/C_1C)\,n_L n_{F^*} + W^A(F_1F^*/C_1F^*)\,n_{F^*}^2$$
$$+ W^A(F_1C/C_1F^*)\,n_L n_{F^*} n_\alpha - W^A(F_1^*C/F_1^*F)\,n_L n_F n_\alpha -$$
$$- W^A(F_1^*C/C_1F)\,n_F n_L n_\alpha + 2W^A(F_1F^*/C_1F')\,n_L n_{F'}$$
$$- 2W^A(F_1'C/F_1^*F)\,n_F^2 n_L + 2W^A(F_1C/C_1F')\,n_L n_{F'} n_\alpha - 2W^A(F_1'C/C_1F)\,n_F^2 n_\alpha$$
$$+ W^A(F_1^*C/C_1F')\,n_L n_{F'} n_\alpha - W^A(F_1'C/C_1F^*)\,n_L n_{F^*} n_F - W^{SI}(C_1F)\,n_F n_L$$
$$+ W^{SI}(C_1F')\,n_L n_{F'} \qquad (6.58)$$

$$\dot{n}_{F^*} = -W(F_1F^*)\,n_{F^*} + W(F_1^*F)\,n_F - W(C_1F^*) + W(F_1^*C)\,n_L n_\alpha + W^{AR}(F_1^*C)\,n_L^2 n_\alpha$$
$$- W^A(F_1F^*/C_1C)\,n_{F^*} n_L + 2W^A(F_1^*C/F_1^*F)\,n_{F^*} n_L n_\alpha + W^A(F_1'C/F_1^*F)\,n_F^2 n_L$$
$$- 2W^A(F_1F^*/C_1F^*)\,n_{F^*}^2 + W^A(F_1^*C/C_1F)\,n_F n_L n_\alpha - W^A(F_1F^*/C_1F')\,n_{F^*} n_{F'}$$
$$- W^A(F_1C/C_1F^*)\,n_L n_{F^*} n_\alpha + W^A(F_1^*C/C_1F')\,n_{F'} n_\alpha n_L$$
$$+ W^A(F_1C/F_1^*F)\,n_F n_L n_\alpha - W^A(F_1'C/C_1F^*)\,n_{F^*} n_F n_L - W^{SI}(C_1F^*)\,n_{F^*} n_L$$
$$- W^A(F_1^*F/C_1C)\,n_F n_L$$

---

1) Bemerkung: Unterstrichene Größen haben folgende Bedeutung:

~~~~~~~~ : Einteilchenübergänge;

_____ : in dieser Arbeit explizit berechnete Terme;

nicht unterstrichen: alle weiteren Zweiteilchenprozesse.
~~~~~~~~

$$\begin{aligned}\dot{n}_{F'} = {} & W(F'_1 c)\, n_F\, n_L - W(c_1 F')\, n_{F'} + W^{AR}(F'_1 c)\, n_F\, n_L^2 + W^{A}(F'_1 c / F''_1 F)\, n_F^2\, n_L \\ & - W^{A}(F_1 F'' / c_1 F')\, n_{F''}\, n_{F'} + W^{A}(F'_1 c / c_1 F)\, n_F^2\, n_L - W^{A}(F_1 c / c_1 F')\, n_{F'}\, n_L\, n_\alpha \\ & + W^{A}(F'_1 c / c_1 F'')\, n_{F''}\, n_F\, n_L - W^{A}(F''_1 c / c_1 F')\, n_{F'}\, n_L\, n_\alpha - W^{SI}(c_1 F')\, n_{F'}\, n_L\end{aligned} \tag{6.59}$$

$$\dot{n}_L = -\left(\dot{n}_F + \dot{n}_{F''} + 2\dot{n}_{F'}\right). \tag{6.60}$$

Die letzte Gleichung (6.55) folgt aus der angenommenen Ladungsneutralität des Kristalls $\delta_{s,\,k+l+2m+n}$.

7. Störstellenverteilungen

Augerübergänge, an denen zwei Störzentren beteiligt sind, werden durch ortsabhängige Koeffizienten beschrieben. In unseren Ableitungen sind zwei solcher Prozesse enthalten. Für diese müssen wir die Ortsverteilungen benachbarter Zentren studieren. Wir tun es an folgendem Übergang:

$$W^A(F,F^*/c,F^*) = \sum_{*} \sum_{\mu',\mu''}{}' W_*^A(\mu'\mu''\| F,F^*/c,F^*)\, g(\mu',\mu'') \tag{7.1}$$

$$= \sum_{\mu',\mu''}{}' W^A(\mu'\mu''\| F,F^*/c,F^*)\, g(\mu',\mu'').$$

Dazu erinnern wir uns an die Definition (6.20).

Nach (7.1) müssen wir also über sämtliche Orte μ' bzw. μ'' im Kristall (Anionenlücken) summieren, wobei die einzelnen Orte mit dem Gewicht $g(\mu',\mu'')$ zu der mittleren Übergangswahrscheinlichkeit $W^A(F, F^*/c, F^*)$ beitragen. Für diese "Zweier"-Dichte gilt nach (6.35) und (6.38) die Normierung

$$\sum_{\mu',\mu''}{}' g(\mu',\mu'') = 1. \tag{7.2}$$

Dieser beschriebene Weg der Berechnung ist aber nicht praktikabel. Aus diesem Grund wollen wir eine modifizierte und auch verständlichere Auswertung vornehmen.

Wie spätere Rechnungen zeigen und wie man ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen kann, gilt für die Übergangsgrößen in (7.1):

$$W^A(\mu'\mu''\| F,F^*/c,F^*) = W^A(\mu'-\mu''\| F,F^*/c,F^*). \tag{7.3}$$

Verwenden wir diese Tatsache, erhalten wir mit der Abkürzung

$$d := |\mu'-\mu''| \tag{7.4}$$

aus (7.1):

$$W^A(F,F^*/c,F^*) = \sum_{\mu} \sum_{\substack{d \\ d\neq 0}} W^A(d \| F,F^*/c,F^*)\, g^{\mu}(d) \qquad (7.5)$$

Es sei angemerkt, daß (7.5) exakt gültig ist, da durch entsprechende Summationsvorschriften aus (7.5) mit (7.4) die rechte Seite von (7.1) entsteht und (7.2) gültig ist. Durch diese Transformation erhalten wir eine qualitativ anderswertige Verteilungsfunktion $g^{\mu}(d)$, die allein vom Relativabstand des Störzentrums vom fixierten Aufpunkt abhängig ist. Da $W^A(d \| F, F^*/c, F^*)$ aber von diesem Aufpunkt nach (7.3) nicht abhängt, können wir die μ-Summation durchführen und erhalten mit (7.2) aus (7.1)

$$W^A(F,F^*/c,F^*) = \sum_{\substack{d \\ \neq 0}} W^A(d \| F,F^*/c,F^*)\, g^1(d) \qquad (7.6)$$

wobei $g^1(d) := \sum_{\mu} g^{\mu}(d)$ gesetzt wurde.

Uns bleibt also noch die Angabe der Verteilungsdichte $g^1(d)$, die den physikalischen Gegebenheiten entspricht. Wir betrachten dazu die äquivalente eindimensionale Kette von äquidistant besetzten Anionen- und Kationenplätzen mit zusätzlichen Fehlstellen:

○ Anionenplatz
● Kationenplatz
⊗ Fehlstelle

In diesem Fall fragen wir, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Störzentrum am Anionplatz $x_1,\ldots,x_8,\ldots$ vorzufinden ist, wenn insgesamt n Störzentren auf dieser linearen Kette der Länge l vorhanden sind. Schreiten wir gedanklich die Kette von links nach rechts ab, so gibt es bei jedem x_i^A [1] zwei Möglichkeiten: entweder es ist ein Störzentrum vorhanden oder nicht. Wir haben es also letzten Endes mit einer Bernoulliverteilung zu tun, da wir nach Abschnitt 6 annehmen, daß das Auftrten eines Zentrums bei x_i^A unabhängig davon ist, ob bei $x_j^A = x_i^A$ ein solches vorhanden ist (siehe (6.21)) und

---

[1] Anionengitterplatz x_i^A

daß die Wahrscheinlichkeiten für das Vorhandensein (oder Nichtvorhandensein) an den verschiedenen Stellen gleich sind.

Diese Wahrscheinlichkeit ist durch (7.7)

$$p = \frac{n_{S_1}}{n_A}$$

n_A : = Anzahl der Anionenplätze

n_{S_1} : = Anzahl der Störzentren

gegeben. Insofern schreibt sich die Verteilungsdichte

$$\bar{g}(i) = \binom{n_A}{i} p^i (1-p)^{n_A - i} . \tag{7.8}$$

Diese Überlegungen übertragen wir nun auf den realen 3-dimensionalen Fall eines Kristalls. Da wegen der Symmetriegruppe O_h alle Anionenplätze auf Symmetrieschalen mit dem Abstand $R_n = d\sqrt{n}$, $n = 1, 2 \ldots$ [1] liegen, verwenden wir den eindimensionalen Fall (7.8) für die Konstruktion der entsprechenden Verteilung. Dies können wir vornehmen, da wir wissen, wieviele Elemente auf einer Schale vorhanden sind. Für größere Abstände vom Zentrum ist deren Anzahl durch

$$\bar{n} = \frac{4\pi R_n^2}{R_0^2} \tag{7.9}$$

gegeben, wobei $R_0^2 := d^2/4^{2/3}$ die einem Anion zur Verfügung stehende Fläche auf der Schale darstellt.

Wir erhalten also mit diesen Ausführungen für $g^1(R_n)$

$$g^1(R_n) \sim \frac{4\pi R_n^2}{R_0^2} \binom{\bar{n}_A}{n} p^n (1-p)^{\bar{n}_A - n} . \tag{7.10}$$

Selbstverständlich gewinnen die Größen n_A bzw. p eine dem Kristall angepaßte Deutung:

$$\bar{n}_A = \frac{1}{d} \tag{7.11}$$

Anzahl der Anionen pro Längeneinheit,

---

[1] d Gitterparameter

$$p = \frac{n_s^{-1/3}}{\bar{n}_A} \qquad n_s \text{ Konzentration der Störzentren.} \tag{7.12}$$

Da die in (7.10) angegebene Form der Verteilung nicht sehr praktisch ist, wenden wir noch folgenden, in der mathematischen Statistik angegebenen Satz /28/ auf (7.10) an. Es gilt nämlich:

Für große Werte von $\bar{n}_A$ läßt sich die Binominalverteilung durch die Normalverteilung mit dem Mittelwert

$$\mu := \bar{n}_A p = n_S^{-\frac{1}{3}} \tag{7.13}$$

und der Varianz

$$\sigma := \sqrt{\bar{n}_A p(1-p)} \approx \sqrt{\mu} \tag{7.14}$$

annähern. Somit erhalten wir als Endergebnis mit einer entsprechenden Normierungskonstante N :

$$g^1(R_n) = \frac{1}{N} \frac{R_n^2}{\sigma R_0^2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{R_n - \mu}{\sigma}\right)^2} . \tag{7.15}$$

In dieser Darstellung wurde bereits von der Uminterpretation der diskreten Zahlen in (7.10) auf diskrete Abstände $R_n = d\sqrt{n}$ Gebrauch gemacht, da der Mittelwert μ bzw. die Varianz σ ebenfalls die Dimension eines Abstandes haben.

Leider ist die Normierungskonstante N nicht explizit anzugeben. Für sie gilt:

$$N = \frac{1}{\sigma} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{d\sqrt{n} - \mu}{\sigma}\right)^2} . \tag{7.16}$$

Das bedeutet, daß sie in späteren Rechnungen maschinell für die jeweiligen Störzentrenkonzentrationen n_s bestimmt werden muß. In Anhang C ist ein FORTRAN-Programm für die Verteilungsdichte $g^1(R_n)$ (7.15) angegeben.

Als Abschluß dieser Betrachtungen geben wir in Abbildung 1 eine anschauliche Darstellung dieser Dichten für verschiedene Störstellenkonzentrationen.

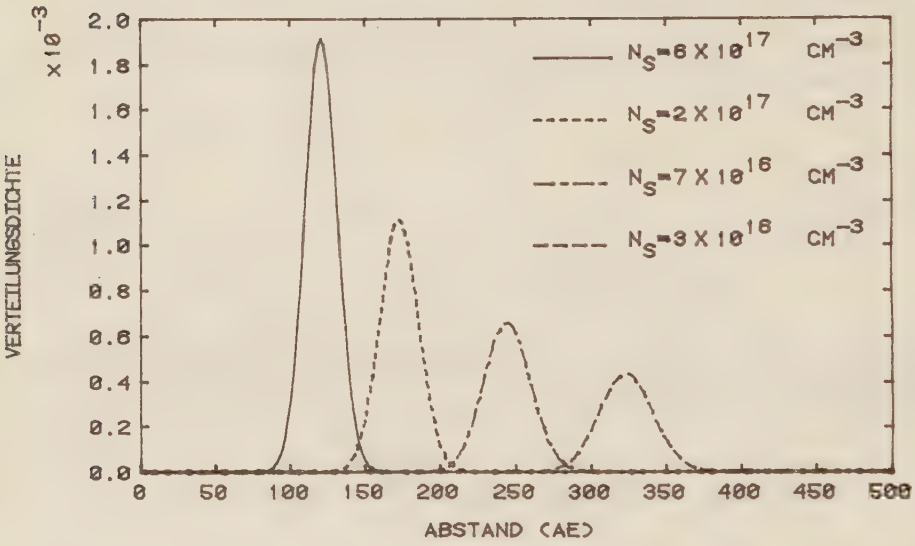


Abb. 1: Verteilungsdichten von Störzentren

8. Augerübergang ($F^* \longrightarrow F$ / $F^* \longrightarrow c$)

Der hier zu betrachtende Übergang stellt eine gleichzeitige Zustandsänderung zweier Störzentrenelektronen dar. Mittels der Coulombwechselwirkung kehrt ein F^* -Zentrenzustand in den Grundzustand zurück, während ein weiterer, das örtlich vom ersteren getrennt ist, ins Leitungsband c ionisiert. Die zugehörige Übergangswahrscheinlichkeit schreibt sich ausführlich mit den Definitionen (6.42), (6.49), (7.6) und (4.39):

$$W^{A}(F,F^*/c,F^*) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{d\neq 0} \Bigg[\sum_{k} I_{F^*}(k,d) \sum_{\substack{m,m' \\ m+m' \leq m_0}} \mathcal{C}^{0}(m,T,\alpha_{F^*\to F})\, \mathcal{C}^{0}(m',T,\alpha_{F^*\to c}) \tag{8.1}$$

$$\delta_{\gamma}\left(2U_{F^*} - U_F - \frac{\hbar k^2}{2m^*} - (m+m')\hbar\omega^{0}\right)\Bigg]\, g^{1}(d)$$ [1]

Wir benutzen für (8.1) folgende Definitionen:

Das elektronische Matrixelement in statischer Näherung ist gegeben durch

$$I_{F^*}(k,d) := \Big| \langle \psi_F(u)\,\psi_c(u'-d,k) \big| e^2 C(u,u') \big| \psi_{F^*}(u)\,\psi_{F^*}(u',d) \rangle - \tag{8.2}$$

$$- \langle \psi_F(u)\,\psi_c(u'-d,k) \big| e^2 C(u,u') \big| \psi_{F^*}(u')\,\psi_{F^*}(u,d) \rangle \Big|^2 .$$

Für die Wellenfunktionen verwenden wir /6,5/:

$$\psi_F(u) = \frac{\alpha^{3/2}}{\sqrt{7\pi}} (1+\alpha r)\, e^{-\alpha r} \tag{8.3}$$

$$\psi_{F^*}(u) = \frac{1}{\sqrt{1+a^2}} \left[\psi_{2s}(u) + \frac{a}{\sqrt{3}} \left\{ \psi_{2p_x}(u) + \psi_{2p_y}(u) + \psi_{2p_z}(u) \right\} \right] \tag{8.4}$$

---

[1] Der Energie-Nullpunkt wird mit der Leitungsbandunterkante zusammengelegt. m^* bezeichnet die effektive Leitungsband-Elektronenmasse.

$$\psi_c(x,k) = \frac{1}{\sqrt{V}}\, u_k(a)\, e^{ikx} \tag{8.5}$$

mit

$$\psi_{2s}(x) = \frac{\gamma^{5/2}}{\sqrt{\pi}}\,(1-\gamma r)\, e^{-\gamma r}$$

$$\psi_{2p_x}(x) = \frac{\beta^{5/2}}{\sqrt{\pi}}\, r \sin\vartheta \cos\varphi\, e^{-\beta r}$$

$$\psi_{2p_y}(x) = \frac{\beta^{5/2}}{\sqrt{\pi}}\, r \sin\vartheta \sin\varphi\, e^{-\beta r} \tag{8.5}$$

$$\psi_{2p_z}(x) = \frac{\beta^{5/2}}{\sqrt{\pi}}\, r \cos\vartheta\, e^{-\beta r}$$

Für die bei d lokalisierte Elektronenwellenfunktion $\psi_{\bar{\tau}\sigma}(x',d)$ gelten entsprechende Wellenfunktionen. Da deren funktionale Gestalt und damit die entsprechenden Integrationen in (8.2) für beliebig orientierte Abstandsvektoren d außerordentlich kompliziert sind, beschränken wir uns in dieser Arbeit auf Wellenfunktionen, die sich in z-Richtung im Abstand R_n befinden. Mit dieser Einschränkung und auftretenden Symmetriebeziehungen zwischen den p-Zuständen kann das Coulomb-Wechselwirkungsglied in (8.2) berechnet werden. Der Austauschterm ließe sich maschinell mit einigem Aufwand ebenfalls auswerten. Wir wollen dies nicht tun, sondern (8.2) durch

$$\underline{I}_{\tau\sigma}(k,R_n) = \alpha_{\tau\sigma} \left| \langle \psi_\tau(x)\, \psi_c(x'-d,k) \left| e^2 C(x,x') \right| \psi_{\bar{\tau}\sigma}(x')\, \psi_{\bar{\tau}\bar{\sigma}}(x',R_n) \right|^2 \tag{8.7}$$

mit $2 \leq \alpha_{\tau\sigma} \leq 4$ darstellen /18/.

Eine Auswertung des Matrixelementes (8.7) befindet sich im Anhang B. Von dort übernehmen wir das Endergebnis (B.17).

$$I_{\mp\sigma}(k,R_n) = \alpha_{\mp\sigma} \sum_{\ell=0}^{\infty} \Bigg\{ \int_0^{\infty} r^2 j_\ell(kr) \Big[a_{\ell,0} c_{\ell+1,0} V_2^{\mp\sigma} f_1(r) \Big(p^1_{\ell+1}(r,\gamma,R_n) - p^2_{\ell+1}(r,\gamma,R_n) \Big) + \quad ^{1)}$$

$$+ c_{\ell+1,0} V_1^{\mp\sigma} f_2(r) \Big(p^1_\ell(r,\gamma,R_n) - p^2_\ell(r,\gamma,R_n) \Big) +$$

$$+ c_{\ell-1,0} b_{\ell,0} V_2^{\mp\sigma} f_1(r) \Big(p^1_{\ell-1}(r,\gamma,R_n) - p^2_{\ell-1}(r,\gamma,R_n) \Big) \qquad (8.8)$$

$$+ V_3^{\mp\sigma} f_1(r) \Big\{ c_{\ell-2,0} b_{\ell,0} b_{\ell-1,0}\, r\, p^1_{\ell-2}(r,\beta,R_n) + (a_{\ell,0} b_{\ell+1,0} +$$

$$+ b_{\ell,0} a_{\ell-1,0}) r p^1_\ell(r,\beta,R_n) + c_{\ell+2,0} a_{\ell,0} a_{\ell+1,0}\, r\, p^1_{\ell+2}(r,\beta,R_n)$$

$$- R_n \big(a_{\ell,0} c_{\ell+1,0} p^1_{\ell+1}(r,\beta,R_n) + b_{\ell,0} c_{\ell-1,0} p^1_{\ell-1}(r,\beta,R_n) \big) \Big\} \Big] \Bigg\}^2 .$$

Dieser Ausdruck enthält die Definitionen:

$$p^1_\ell(r,\xi,R_n) := \int_{-1}^{1} P_\ell(u)\, e^{-\xi\sqrt{r^2+R_n^2-2rR_nu}}\, du \qquad (8.9)$$

$$p^2_\ell(r,\xi,R_n) := \xi \int_{-1}^{1} \sqrt{r^2+R_n^2-2rR_nu}\; P_\ell(u)\, e^{-\xi\sqrt{r^2+R_n^2-2rR_nu}}\, du \qquad (8.10)$$

$$f_1(r) := r^{-2} \int_0^r r'^4 (1+\alpha r')\, e^{-(\alpha+\beta)r'}\, dr' + r \int_r^{\infty} r' (1+\alpha r')\, e^{-(\alpha+\beta)r'}\, dr' \qquad (8.11)$$

---

1) Dabei wurde die Leitungsbandfunktion (8.5) mit $U_k(\alpha r) \equiv 1$ verwendet. Bei Verwendung von Polaronenfunktionen verkleinert sich das Endergebnis um $10^{-1} - 10^{-3}$.

$$f_2(r) := r^{-1} \int_0^r r'^2(1+\alpha r')(1-\gamma r') e^{-(\alpha+\beta)r'} dr' + \int_r^\infty r'(1+\alpha r')(1-\gamma r')\, e^{-(\alpha+\beta)r'} dr' \quad (8.12)$$

Die übrigen konstanten Größen sind in Anhang B angegeben.

Wie man sieht, kann das elektronische Matrixelement nicht analytisch ausintegriert werden. Es bleibt eine letzte Integration in r übrig. Diese wurde, um auf numerische Ergebnisse zu kommen, mit Hilfe der in Anhang C angegebenen FORTRAN-Funktion durchgeführt. Ebenfalls in Anhang C sind weitere Einzelheiten über die numerischen Berechnungen von (8.8) geschildert. So sind dort auch die beiden Funktionen (8.9) und (8.10) exakt berechnet und durch ein FORTRAN-Programm der numerischen Berechnung zugänglich.

Bei der weiteren Auswertung von (8.1) approximieren wir die Lorentzfunktion wegen der Tatsache $\gamma \ll \hbar\omega^0$ durch eine scharfe Deltafunktion und ersetzen

$$\sum_{\vec{k}} \approx \frac{V}{8\pi^3} \int \frac{d\sigma\, dk}{|\mathrm{grad}_{\vec{k}} E(\vec{k})|} = \int_{E_L^u=0}^{E_L^o} D(E)\, dE , \quad (8.13)$$

wobei D(E) bereits in (A.17) angegeben ist. Nach der Integration über E erhalten wir aus (8.1):

$$W^A(\vec{r}_1\vec{r}^*/\vec{r}_1\vec{r}^*) = \frac{1}{\pi^2\hbar}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sum_{R_n} \left\{ \sum_{m\le m_0} \left(2U_{FF'} - U_F - m\hbar\omega^0\right)^{3/2} I_{FF'}(k_m, R_n)\, ph(m, T, \alpha_{F\to F'}, \alpha_{F'\to F}) \right\} \times g^{1)}(R_n, n_s) \quad (8.14)$$

mit den Abkürzungen:

$$ph(m, T, \alpha_1, \alpha_2) := \sum_{m'} \mathfrak{S}(m, T, \alpha_1)\, \mathfrak{S}(m-m', T, \alpha_2) \quad (8.15)$$

$$k_m := \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m^*(2U_{FF'} - U_F - m\hbar\omega^0)} \quad (8.16)$$

---

1) $n_s \triangleq$ Störstellenkonzentration

$$m_o := \left[\frac{2U_{FF} - U_F}{\hbar\omega^*} \right] . \qquad (8.17)$$

In ph(m,T) sind die Phononenanteile von (8.1) zusammengefaßt und $g^1(R_n, n_s)$ stellt die in (7.13) angegebene Störstellenverteilungsdichte mit dem äußeren Parameter n_s (Störstellenkonzentration) dar.

Im einzelnen können wir unser Ergebnis (8.14) wie folgt interpretieren:

Der Summationsindex m stellt die beim Übergang erzeugten ($m \geq 0$) bzw. vernichteten ($m < 0$) Phononen dar. Die maximale Anzahl der entstehenden Phononen ist durch m_o (8.17) gegeben. Diese Summationsgrenze muß eingeführt werden, da dadurch gerechtfertigt ist, daß der Übergang tatsächlich ins Leitungsband führt ($E(k) \geq 0$) .

Über die Verteilungsfunktion g^1 und der dazugehörigen Summation über die Störzentrenorte erhalten wir eine konzentrationsabhängige Wahrscheinlichkeit des Zweiteilchenübergangs. So wie $W^A(F, F^*/c, F^*)$ in (8.14) angegeben ist, hat diese Übergangswahrscheinlichkeit die Einheit $\left[\text{sec}^{-1} \right]$. Falls wir aber die mittleren Besetzungszahlen (die ja dimensionslos sind) der rate equations (6.52) - (6.55) auf experimentell angepaßte mittlere Konzentrationen

$$\bar{n}_i := \frac{n_i}{V} \qquad \text{mit} \qquad i = F, F^*, F', L \qquad (8.18)$$

umrechnen, erhält die obige Übergangswahrscheinlichkeit die Dimension $\left[\frac{\text{cm}^3}{\text{sec}} \right]$. Aus entsprechenden Gründen ändern sich auch die übrigen in den rate equations auftretenden Wahrscheinlichkeiten. Wir verweisen aus diesem Grund auf die hier angeführte Transformation.

Numerische Auswertung

Die in den einzelnen Größen in (8.14) vorkommenden Konstanten wie Energiewerte, Huang-Rhys-Faktoren, Wellenfunktionsparameter usw. sind in Anhang F zusammengestellt. Wir geben sie aus diesem Grunde hier nicht an, sondern verweisen auch bei weiteren Rechnungen auf diesen Anhang.

Über die Phononenbeteiligung tritt in den differentiellen Übergangswahrscheinlichkeiten eine von der Temperatur abhängige Resonanzstruktur im Energiespektrum der Leitungsbandelektronen auf.

Wie bereits von Heinzel /7/ gezeigt wurde, haben die $\mathcal{G}$ -Funktionen bei Vernachlässigung der Frequenzverschiebung der lokalisierten Störscheingung beim Übergang ihr Maximum in $\alpha_i^2 \hbar\omega^0$ [1]. Mit dieser Kenntnis erhalten wir für unsere Prozesse eine entsprechende Resonanzbedingung, da die Phononenfunktion (8.15) durch die Multiplikation zweier Gaußfunktionen approximiert werden kann, die wiederum Gaußcharakter mit der Resonanzenergie

$$E_{res} = 2U_{F'} - U_F - (\alpha^2_{F'\to F} + \alpha^2_{F'\to C})\hbar\omega^0 \qquad (8.19)$$

besitzt. Im Konfigurationskoordinaten-Modell läßt sich diese Bedingung sehr leicht veranschaulichen [2] :

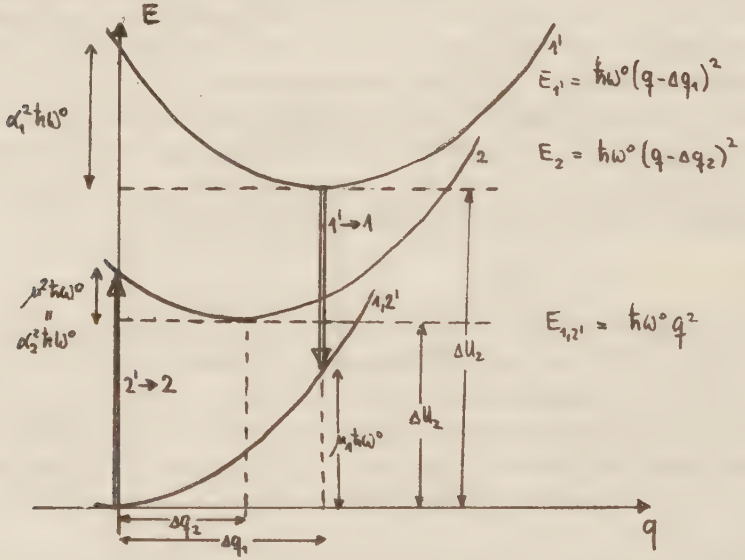


Abb. 2: Konfigurationskoordinaten-Modell für den Augerübergang

---

1) α_i stellt den in Anhang F angegebenen Huang-Rhys-Faktor dar. Siehe auch Abschnitt 1, Definition (1.37) ff.

2) Private Mitteilung von Dipl.-Phys. E. Schöll, Dr. phil.

Nach Abbildung 2 gilt für die Resonanz ($\hat{=}$ Länge (Pfeil 1' → 1) = = Länge (Pfeil 2' → 2))

$$\frac{\Delta U_2}{\hbar\omega^0} + \alpha_2^2 = \frac{\Delta U_1}{\hbar\omega^0} + \alpha_1^2 . \tag{8.20}$$

Aus dieser Gleichung folgt (8.18), falls die entsprechenden Energien in (8.19) eingesetzt werden. Diese Bedingung entspricht einer quasiklassischen Näherung der Übergangswahrscheinlichkeit.

Die Kenntnis der Resonanzstruktur lassen wir uns bei der numerischen Berechnung von (8.14) zugute kommen. Wie maschinelle Rechnungen des elektronischen Anteils (8.8) gezeigt haben, wird für die Berechnung eines Wertes I_F mit festem K und R_n sehr viel Rechenzeit auf dem verwendeten Computer gebraucht. Da man aber ca. 100 K-Werte und tausende R_n-Werte für die exakte Berechnung von I_F benötigen würde, führen wir zwei numerische Näherungsverfahren bei der Berechnung ein:

(a) Um die K-Werte zu reduzieren, berechnen wir I_{F*} durch einen Mittelwert $\overline{I}_{F*}$ über 10 verschiedene K- bzw. E-Werte um die Resonanzenergie (8.18) und approximieren den gesamten Energiebereich durch diesen konstanten Mittelwert:

$$W^A(F,F^*/C,F^*) = \frac{1}{\pi^2\hbar}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sum_{R_n} \overline{\overline{I}}_{F*}(R_n)\left\{\sum_{m \geq m_0} (2U_{F*} - U_F - m\hbar\omega^0)^{1/2}\, ph(m,T,\alpha_{F \to F^*}, \alpha_{F^* \to C})\right\} g^1(R_n) \tag{8.21}$$

(b) Natürlich läßt sich die R_n-Summation nicht so einfach erledigen. Wir berechnen deshalb für 10 verschiedene Abstände R_n die entsprechenden Werte $\overline{I}_F(R_n)$, (n = 1,...,10) , die gleichmäßig über ein Abstandsintervall verteilt werden. Dieses Intervall wird so gelegt, daß die mittleren Abstände von Störzentren des Konzentrationsbereiches 10^{16} cm^{-3} bis $5 \cdot 10^{18}$ cm^{-3} darin enthalten sind. Diese Werte nehmen wir dann als Stützstellen, um die übrigen Werte durch eine Spline-Interpolation zu berechnen. In Anhang C ist das FORTRAN-Programm für diese Interpolation angegeben.

Das Ergebnis unserer Rechnungen für KI ist in Tabelle 1 und Abbildung 3 dargestellt:

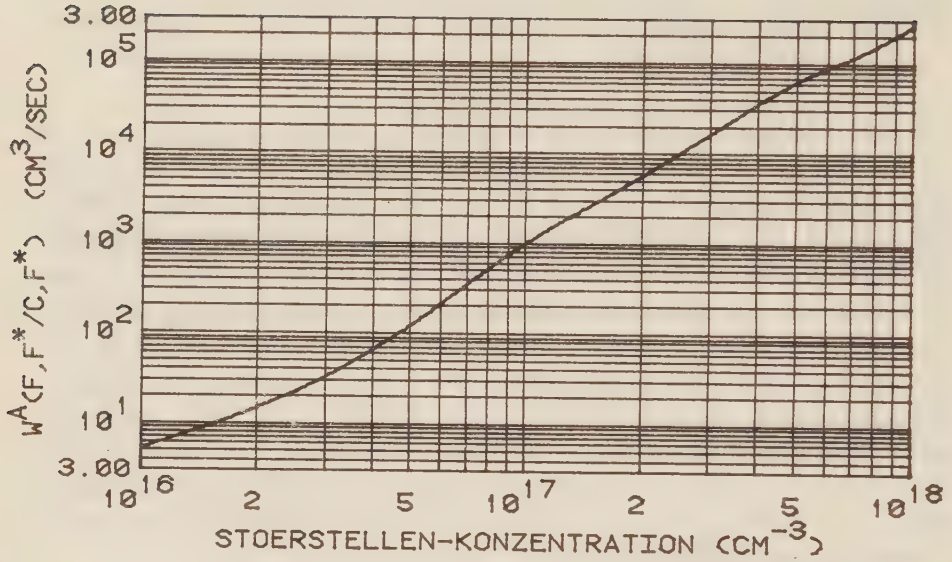


Abb. 3: Augerübergangswahrscheinlichkeit $W^A(F,F^* /c,F^*)$ in KI

Störstellenkonzentration n_s $[cm^{-3}]$	Übergang $W^A(F,F^* /c,F^*)$ $[cm^3/sec]$
$1 \cdot 10^{16}$	$5.2 \quad 10^0$
$3 \cdot 10^{16}$	$3.2 \quad 10^1$
$5 \cdot 10^{16}$	$1.2 \quad 10^2$
$8 \cdot 10^{16}$	$5.2 \quad 10^2$
$1 \cdot 10^{17}$	$1.0 \quad 10^3$
$2 \cdot 10^{17}$	$5.6 \quad 10^3$
$3 \cdot 10^{17}$	$1.6 \quad 10^4$
$5 \cdot 10^{17}$	$6.2 \quad 10^4$
$8 \cdot 10^{17}$	$1.5 \quad 10^5$
$1 \cdot 10^{18}$	$2.6 \quad 10^5$

Tabelle 1: Augerübergangswahrscheinlichkeit $W^A(F,F^* /c,F^*)$ zur Temperatur $T = 70^\circ$ K in KI

Als weiteres Ergebnis unserer Rechnungen zeigt sich, daß dieser Prozeß von der Temperatur unabhängig ist. Diese Tatsache läßt sich auch leicht aus der Abbildung 4 herauslesen. Diese Abbildung stellt die differentielle Übergangswahrscheinlichkeit $W_D^A(F,F^*/c,F^*)$ dar, die durch

$$W_D^A(F,F^*/c,F^*) \sim \sum_{R_n} \overline{I}_{FF}(R_n)\, ph(m,T,d_{F,F},d_{F^*,c})\, g^1(R_n,n_s) \qquad (8.22)$$

gegeben ist.

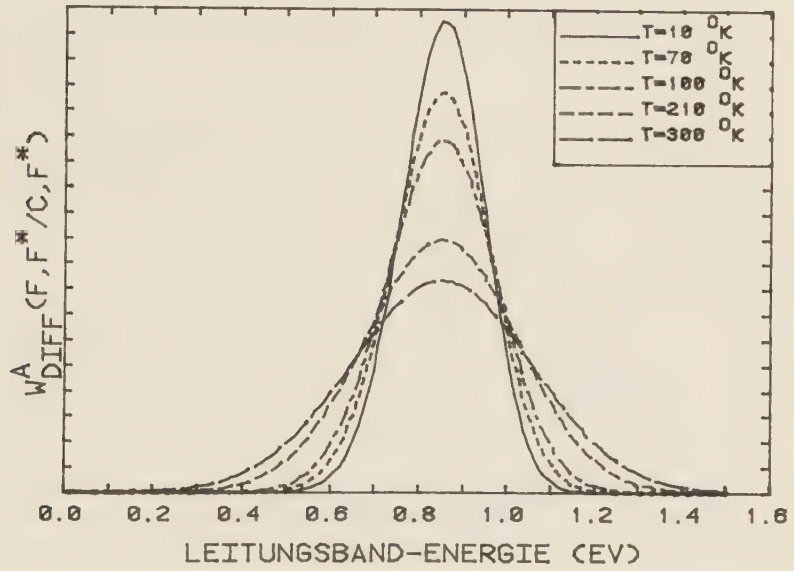


Abb. 4: Diff. Übergangswahrscheinlichkeit $W^A(F,F^*/c,F^*)$ in KI

Man sieht, daß die Flächen unter den Kurven zu verschiedenen Temperaturen annähernd gleich sind, da deren Maximum genügend weit von der Leitungsbandunterkante entfernt ist. Aus dieser Tatsache läßt sich somit schließen, daß bei anderen Störzentren zweierlei Temperaturverhalten für Augerprozesse der hier betrachteten Art zu erwarten sind:

(a) $E_{res} \approx \Delta E_H$ (Halbwertsbreite der Auger-Bande) : [1]
steigende Temperatur : fallende Übergangswahrscheinlichkeit

---

[1] Leitungsbandunterkante entspricht dem Energie-Nullpunkt.

(b) $E_{res} \approx - \Delta E_H$ (Resonanzenergie liegt nicht mehr im Leitungsband)

steigende Temperatur : steigende Übergangswahrscheinlichkeit

Als Abschluß dieses Abschnitts sei noch bemerkt, daß die Resonanzformel (8.18) durch Abbildung 4 eine ausgezeichnete Bestätigung findet, wobei der exakte Phononenanteil (8.15) verwendet wurde.

9. Augerübergang ($F^* \longrightarrow F\ /\ F' \longrightarrow c$)

In diesem Teil wollen wir uns die Erkenntnisse des vorigen Abschnitts zunutze machen, um in gekürzter Form unsere numerischen Rechnungen darzustellen. Entsprechend (8.1) ist für diesen Übergang die Wahrscheinlichkeit

$$W^{A}(F,F^*/c,F') = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{d\neq 0}\Big[\sum_{k}\sum_{\substack{m,m'\\ m+m'\geq m_0'}} I_{F'}(k,d)\,\mathcal{G}(m,T,\alpha_{F^*\to F})\,\mathcal{G}(m',T,\alpha_{F'\to c})\cdot \tag{9.1}$$

mit $$\cdot\,\delta_{\gamma}\Big(U_{F^*}+U_{F'}-U_F-\frac{\hbar k^2}{2m^*}-(m+m')\hbar\omega^{0}\Big)\Big]\,g^{1}(d,n^{s})$$

$$m_0' := \left[\frac{U_F+U_{F'}-U_F}{\hbar\omega^0}\right] \tag{9.2}$$

$$I_{F'}(k,d) := \Big|\langle\psi_F(a)\,\psi_c(a'-d,k)\,|e^2C(a,a')|\,\psi_{F^*}(a)\,\psi_{F'}(a',d)\rangle - \tag{9.3}$$
$$-\langle\psi_F(a)\,\psi_c(a'-d,k)\,|e^2C(a,a')|\,\psi_{F'}(a')\,\psi_{F'}(a',d)\rangle\Big|^2.$$

Die in (9.2) vorkommenden Wellenfunktionen sind teilweise bereits in Abschnitt 8 und Anhang B dargestellt und durch /6/

$$\psi_{F'}(a,a',d) = \frac{\delta^{3/2}}{\sqrt{7\pi}}\left(1+\delta\sqrt{r^2+d^2-2rd\cos\vartheta}\right)e^{-\delta\sqrt{r^2+d^2-2rd\cos\vartheta}}\cdot$$
$$\cdot\,\frac{\delta^{3/2}}{\sqrt{7\pi}}\left(1+\delta\sqrt{r'^2+d^2-2r'd\cos\vartheta}\right)e^{-\delta\sqrt{r'^2+d^2-2r'd\cos\vartheta}} \tag{9.4}$$

$$\psi_{F'}(a,a') = \frac{\delta^{3/2}}{\sqrt{7\pi}}(1+\delta r)\,e^{-\delta r}\;\frac{\delta^{3/2}}{\sqrt{7\pi}}(1+\delta r')\,e^{-\delta r'}$$

angegeben. Die Auswertung von (9.2) befindet sich in Anhang E und hat als Ergebnis:

$$I_{F'}(k,d) = \varkappa_{F'}\sum_{l=0}^{\infty} I_l^{F'}(k,R_m) \tag{9.5}$$

mit der Definition:

$$I_\ell^{F'}(k,P_n) := \Big\{ w^2 \int_0^\infty j_\ell(kr) \Big\{ V_1^{F'} f_2(r)\, c_{\ell,0} \left[p_\ell^1(r,\delta,P_n) + p_\ell^2(r,\delta,P_n) \right] +$$

$$+ V_2^{F'} f_1(r) \Big(a_{\ell,0}\, c_{\ell+1,0} \left[p_{\ell+1}^1(r,\delta,P_n) + p_{\ell+1}^2(r,\delta,P_n) \right] + b_{\ell,0}\, c_{\ell-1,0} \left[p_{\ell-1}^1(r,\delta,P_n) + p_{\ell-1}^2(r,\delta,P_n) \right] \Big) \Big\}^2 \Big\}^2 . \tag{9.6}$$

Die in diesem Ausdruck vorkommenden Größen sind in Abschnitt 8 und Anhang E angegeben.

Mit entsprechenden Definitionen und numerischen Verfahren des Abschnitts 8 erhalten wir für (9.1)

$$W^A(F,F^*/c,F') = \frac{1}{\pi^2 \hbar} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sum_{P_n} \overline{I}_{F'}(P_n) \sum_{m \geq m_0'} \left(U_{F^*} + U_{F'} - U_F - m\hbar\omega^0 \right)^{1/2} \rho_h(m, T, \alpha_{F^* \to F}, \alpha_{F' \to c})\, g^2(P_n, n_s) . \tag{9.7}$$

Die Einheit dieser Übergangswahrscheinlichkeit ist $[\mathrm{cm}^3/\mathrm{sec}]$ (siehe Abschnitt 8 (8.17)). Nach (8.19) schreibt sich die Resonanzenergie in diesem Fall:

$$E_{res} = U_{F^*} + U_{F'} - U_F - \left(\alpha^2_{F^* \to F} + \alpha^2_{F' \to c} \right) \hbar\omega^0 . \tag{9.8}$$

Ohne auf weitere Einzelheiten einzugehen, geben wir in Tabelle 2 und den Abbildungen 5 und 6 die numerischen Endergebnisse für KI an.

Störstellenkonzentration n_s $[\mathrm{cm}^{-3}]$	Übergang $W^A(F,F^*/c,F')$ $[\mathrm{cm}^3/\mathrm{sec}]$
$1 \cdot 10^{16}$	$5.9 \quad 10^2$
$3 \cdot 10^{16}$	$5.1 \quad 10^3$
$5 \cdot 10^{16}$	$1.8 \quad 10^4$
$8 \cdot 10^{16}$	$5.9 \quad 10^4$
$1 \cdot 10^{17}$	$9.1 \quad 10^4$
$2 \cdot 10^{17}$	$2.8 \quad 10^5$
$3 \cdot 10^{17}$	$6.0 \quad 10^5$
$5 \cdot 10^{17}$	$1.5 \quad 10^6$
$8 \cdot 10^{17}$	$3.0 \quad 10^6$
$1 \cdot 10^{18}$	$4.5 \quad 10^6$

Tabelle 2: Augerübergang $W^A(F,F^*/c,F')$ bei der Temperatur $T = 70^\circ$ K in KI

Über die Temperaturabhängigkeit von $W^A(F,F^*/c,F')$ gilt, was am Ende des vorigen Abschnitts ausgeführt wurde. Die in Abbildung 6 dargestellte differentielle Übergangswahrscheinlichkeit schreibt sich gemäß (8.21):

$$W_D^A(T,F^*/c,F') \sim \sum_{R_n} \overline{I}_{F'}(R_n)\, \rho^h(m,T,\alpha_{F^*\to F},\alpha_{F\to c})\, g^1(R_n,n_s) \,. \tag{9.9}$$

In /65/ wurde die zu diesem Prozeß gehörige Lebensdauer zu

$$\tau_{F'}^A = \tau_R \left(\frac{R}{R_0}\right)^6 \tag{9.10}$$

berechnet. Mit den in dieser Arbeit ebenfalls angegebenen Größen τ_R (Lebensdauer des strahlenden Übergangs) und R_0 (Abstand) berechnet sich die dazugehörige Übergangswahrscheinlichkeit in derselben Größenordnung wie die oben angegebenen.

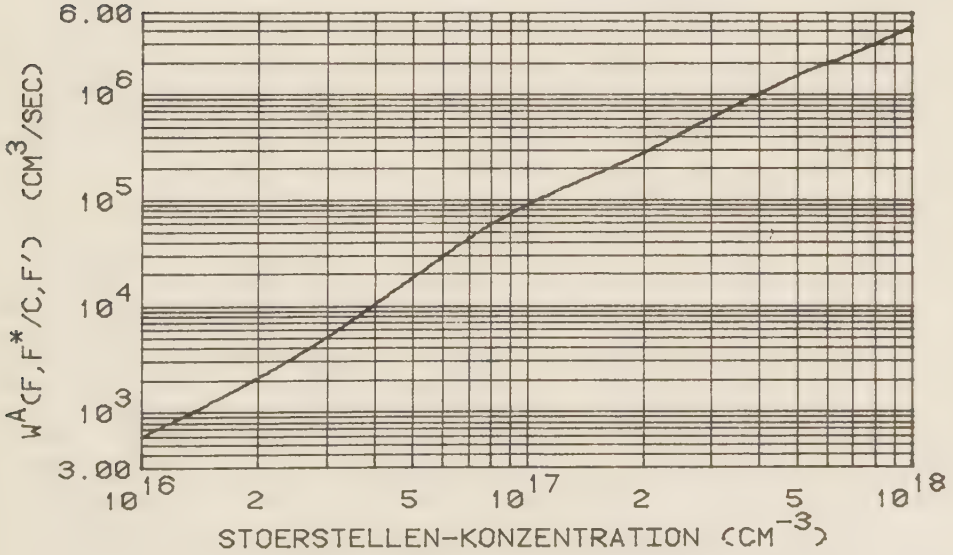


Abb. 5: Augerübergang $W^A(F,F^*/c,F')$ in KI

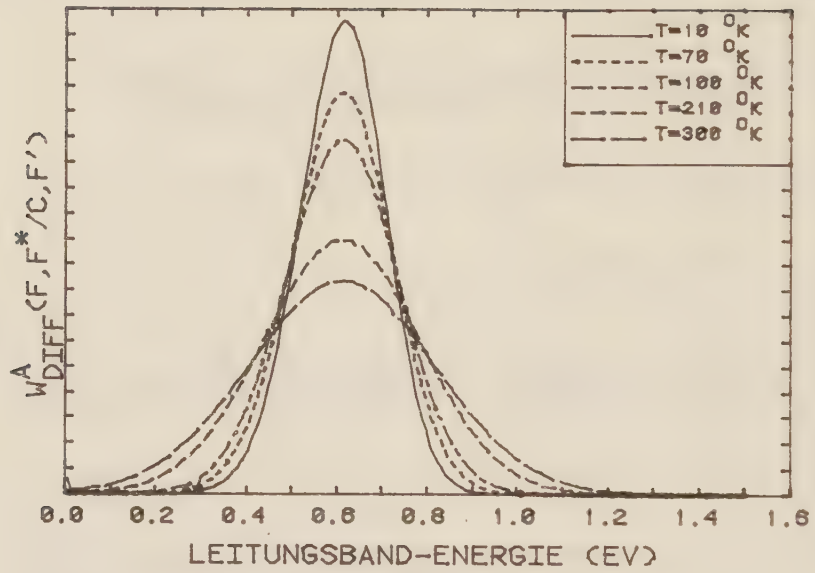


Abb. 6: Diff. Übergangswahrscheinlichkeit $W_D^A(F,F^*/c,F')$ in KI

10. Augerübergänge mit äußerem elektrischen Feld

Um ein äußeres elektrisches oder quasistatisches elektrisches Feld konsistent in die bisher dargelegte Theorie einzubauen, müssen wir einige grundlegende Bemerkungen vorausschicken. Es sei bereits an dieser Stelle darauf aufmerksam gemacht, daß die hier dargelegten Gedankengänge von H. Stumpf /31/ entwickelt wurden.

Gewöhnlich wird der Einfluß eines äußeren elektrischen Feldes in der Quantenmechanik durch die Störungstheorie beschrieben, was zu dem Stark-Effekt führt. Dabei wird natürlich im allgemeinen die Tatsache verschwiegen, daß durch ein elektrisches Feld ein vorher teilweise diskretes und kontinuierliches Spektrum in ein vollständiges kontinuierliches verändert wird, so daß in diesem Fall keine Störungstheorie mehr verwendet werden darf. Dies erfordert ein anderes Vorgehen, um beide Prozesse gleichzeitig theoretisch beschreiben zu können: Schaltet man zur Zeit $t=t_o$ ein, so müssen in der Zeit vor t_o die Elektronen im Kristallvolumen vorhanden sein und durch die in (1.16) bzw. (3.5) angegebene Elektronenfunktion beschrieben werden, während nach t_o die Wellenfunktionen $\chi^c(\kappa,\mathfrak{R},E)$ die Elektronenzustände beschreiben, die nicht wie die ersteren normierbar sind. Zur Zeit t_o muß aber gelten:

$$\chi^c(\kappa,\mathfrak{R})\Big|_{t=t_o} = \int C(E,t_o)\,\chi^c(\kappa,\mathfrak{R},E)\,dE\,. \tag{10.1}$$

Da die linke Seite dieser Gleichung auf 1 normierbar ist, während die Funktionen $\chi^c(\kappa,\mathfrak{R},E)$ auf diese Weise nicht normierbar sind, müssen die Entwicklungskoeffizeiten $C(E,t_o)$ über das Energiespektrum verschmiert sein, so daß (10.1) keine stationäre Eigenlösung des Hamiltonoperators darstellt.

Durch diese Tatsache gilt: Normierbarkeit und Eigenfunktion zu sein, ist im Fall eines äußeren elektrischen Feldes nicht gleichzeitig erfüllbar.

Wir entscheiden uns aus Gründen der Zweckmäßigkeit für die Normierungsbedingung. Somit erhalten wir keine Eigenfunktionen des Hamiltonoperators:

$$\hat{h}^{E}(x,\mathcal{R}) := \hat{h}(\mathcal{R},x) + V_E(\mathcal{R},x) \quad . \tag{10.2}$$

Dafür gewinnen wir aber eine deduktive Beschreibung des Tunnel-Effektes und Leitungsbandphänomene durch die Nichtdiagonalanteile des Hamiltonoperators (10.2), die als Störoperatoren in unsere Theorie zur Beschreibung von Halbleitern eingehen. Diese Operatoren sind nicht Gegenstand dieser Arbeit und sollen insofern keiner weiteren Betrachtung unterzogen werden /32/. Die durch sie induzierten Übergänge müssen natürlich konsequenterweise bei reaktionskinetischen Untersuchungen mitberücksichtigt werden. Insbesondere benötigt man die Feldionisationswahrscheinlichkeit des F^*-Zentrums. Wir weisen deshalb auf /32/ hin.

Wir geben hier allein die für unsere Beschreibung von Augerprozessen mit äußerem elektrischen Feld notwendige Tatsachen an. So ist in /31/ gezeigt, daß, falls der durch (3.5) angegebene Hartree-Fock-Zustand mit gebundenen Zuständen und reinen Blockfunktionen als Elektronenzustand in den Übergangswahrscheinlichkeiten Verwendung findet und der Annahme einer adiabatischen Kopplung zwischen Leitungsbandreaktionen und Störstellenprozessen (Anhang A), die Kinetik der Leitungsbandelektronen unter äußerem elektrischen Feld durch die Boltzmann-Gleichung

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial}{\partial t} - e\mathcal{E}\cdot\nabla_k\right) f(k,t) = \sum_{k'} \Big\{ & f(k',t)\left[1-f(k,t)\right] W(k,k') - f(k,t)\left[1-f(k',t)\right] W(k',k) \Big\} \\ + \sum_{k',k'',k'''} \Big\{ & W(kk'|k''k''')\left[1-f(k,t)\right]\left[1-f(k',t)\right] f(k'',t)\, f(k''',t) - \\ & - W(k''k'''|kk')\, f(k,t)\, f(k',t)\left[1-f(k'',t)\right]\left[1-f(k''',t)\right] \Big\}\end{aligned} \tag{10.3}$$

bestimmt wird. Die in ihr vorkommenden Übergangswahrscheinlichkeiten resultieren durch Teile der oben beschriebenen nichtdiagonalen Störoperatoren und sollen hier nicht angegeben werden.

Als weiteres finden sich die gebundenen Zustände einer Modifikation unterworfen, die über das Variationsprinzip in die Variationsparameter eingeht.

Mit diesen beiden Konsequenzen haben wir eine konsistente Form zur Beschreibung von Augerprozessen mit äußerem elektrischen Feld gefunden, so daß die bisher abgeleiteten rate-equations und Übergangswahrscheinlichkeiten keine neue Ableitung notwendig machen.

Insofern können wir uns sofort einer Lösung der Boltzmann-Gleichung (10.3) zuwenden. Das Problem der Variationsparameter als Funktion des äußeren elektrischen Feldes wurde von Sieber /33/ untersucht. Da es den Rahmen dieser Arbeit bei weitem sprengen würde, wollen wir hier die Gleichung (10.3) mit ihren Lösungen in allen Einzelheiten nicht untersuchen und schlagen deshalb einen phänomenologischen Weg ein, um deren Lösung zu erhalten.

Diese Inkonsequenz in unseren Betrachtungen läßt sich leider zur Zeit nicht vermeiden [1].

Ohne Feld hat die Boltzmann-Gleichung (10.3) als stationäre Lösung die Fermi-Dirac-Verteilung

$$f_0(\vec{k}) = \left(e^{\beta\left(\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m^*} - E_F\right)} + 1 \right)^{-1} . \tag{10.4}$$

Wie in Anhang A gezeigt wird, läßt sich diese Verteilung im vollständig nichtentarteten Fall eines Halbleiters durch die gewöhnliche Boltzmann-Verteilung annähern:

$$f_0(\vec{k}) \cong \frac{n_L}{n_0} e^{-\beta \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m^*}} = \frac{n_L}{n_0} e^{-\beta E(\vec{k})} . \tag{10.5}$$

Da das Vorhandensein eines elektrischen Feldes eine Driftbewegung der Leitungsbandelektronen hervorruft, was einer Verschiebung der Energieverteilung der Leitungsbandelektronen um die Driftenergie gleichkommt, wird in der phänomenologischen Festkörperphysik eine Lösung der Boltzmann-Gleichung (10.3) durch eine verschobene Boltzmann-Verteilung approximiert /34/:

---

[1] Untersuchungen sind zur Zeit von W. Kleih in Vorbereitung.

$$f(\vec{k}) = \frac{n_L}{n_0'} e^{-\beta \frac{(\hbar\vec{k} - m^* \vec{v}_D)^2}{2m^*}} \approx \frac{n_L}{n_0'} \left(1 + \beta\hbar \vec{k}\cdot\vec{v}_D + \frac{1}{2}(\beta\hbar\vec{k}\cdot\vec{v}_D)^2 + \dots\right) e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + E_D\right)} \quad 1) \qquad (10.6)$$

$$=: n_L \, f'(\vec{k}, E^\alpha)$$

In dieser Darstellung wird die Driftgeschwindigkeit $\vec{v}_D$ durch

$$\vec{v}_D = \mu \vec{E} \qquad (10.7)$$

gegeben, in welcher der Proportionalitätsfaktor die experimentelle Elektronenbeweglichkeit repräsentiert. Es bleibt uns also in diesem Konzept allein die Aufgabe, diese Größe μ zu bestimmen.

Nach Seeger /34/ gilt für die Beweglichkeit μ :

$$\mu = \frac{|e|}{m} \overline{\tau_m} = \frac{|e|}{m} \int \tau_m \, f(v) \, dv . \qquad (10.8)$$

In (10.8) stellt $\overline{\tau_m}$ die mittlere Stoßzeit der Elektronen dar. Weiter läßt sich τ_m durch

$$\tau_m = \tau_0 \left(\frac{E}{kT}\right)^r \qquad (10.9)$$

mit

$$\tau_0 := \frac{\ell}{\sqrt{2kT/m^*}} \qquad (\ell = \text{mittlere freie Weglänge}) \qquad (10.10)$$

und einem Faktor r , der dem jeweiligen Streumechanismus angepaßt ist, darstellen. Für μ erhält man nach (10.8) mit (10.9) die Form:

$$\overline{\tau_m} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \frac{1}{(\frac{3}{2} - r)!} \tau_0 \frac{F_{1/2}\left(\frac{E}{kT}\right)}{F_{1/2-r}\left(\frac{E}{kT}\right)} \quad 2) \qquad (10.11)$$

---

1) Der Normierungsfaktor ist in Anhang G berechnet.

2) $F_{1/2}$ repräsentiert das Fermi-Integral.

Nach diesen allgemeinen Erörterungen betrachten wir die verschiedenen Streumechanismen im Fall eines Ionenkristalls mit Farbzentren.

(a) Akustische Streuung: τ_m^{ac}

Nach dataillierten Rechnungen in /34/ gilt für τ_m^{ac} :

$$\tau_m^{ac} = A^{ac} E^{-1/2} . \tag{10.12}$$

Für die Beweglichkeit μ^{ac} gilt somit nach (10.8):

$$\mu^{ac} = B^{ac} T^{-3/2} . \tag{10.13}$$

In den Faktoren A^{ac} und B^{ac} in den Formeln (10.12) und (10.13) sind die materialabhängigen Konstanten zusammengefaßt /34/. Wir werden sie aus dem Experiment entnehmen.

(b) Optische Streuung: τ_m^{op}

Nach /34/ gilt für τ_m^{op} bei Temperaturen $T < \theta$

$$\tau_m^{op} = A_1^{op} e^{\frac{\theta}{T}} + A_2^{op} \tag{10.14}$$

und somit für μ^{op} :

$$\mu^{op} = B^{op} e^{\frac{\theta}{T}} - C^{op} . \tag{10.15}$$

In (10.14) bzw. (10.15) stellt θ die Debye Temperatur der optisch polaren Phononen dar, während für die Konstanten $A_{1,2}^{op}$ B^{op} und C^{op} dasselbe wie in (a) gilt.

(c) Streuung an neutralen Störstellen

Für diesen Streumechanismus gilt für nicht zu große Energiewerte des zu streuenden Elektrons, daß er energieunabhängig ist /35/:

$$\tau_m^{ns} = A^{ns} . \tag{10.16}$$

Insofern gilt $r = 0$ und nach (10.11) schreibt sich die Beweglichkeit μ^{ns} :

$$\mu^{ns} = B^{ns} . \tag{10.17}$$

Wir wollen aus diesen drei Streumechanismen die resultierende Beweglichkeit bestimmen. Da wir aber Beweglichkeiten verschiedener Art nicht einfach addieren können, was zu unphysikalischen Effekten führen würde, müssen wir die mit ihnen berechneten "Widerstände" addieren. Da aber $R \sim \frac{1}{\mu}$ ist, addieren sich die Kehrwerte von (10.13), (10.15) und (10.17):

$$\mu^{-1} = \frac{1}{\mu^{ac}} + \frac{1}{\mu^{op}} + \frac{1}{\mu^{ns}} \quad . \tag{10.1}$$

Mit dieser Gesamtbeweglichkeit von Leitungsbandelektronen haben wir letztlich über (10.8) eine approximierte Lösung der Boltzmann-Gleichung (10.3) gefunden.

Insofern sind wir befähigt, von einem äußeren elektrischen Feld abhängige Augerprozesse zu berechnen. Dies soll im nächsten Abschnitt in Angriff genommen werden. Vorher aber fassen wir aus /36/ die experimentell bestimmten Größen B^{ac}, B^{op}, C^{op}, Θ und B^{ns} in Tabelle 3 zusammen. In Abbildung 7 ist der Verlauf der mit diesen Parametern nach (10.18) berechneten Gesamtbeweglichkeit dargestellt.

B^{ac}	B^{op}	C^{op}	B^{ns}	Θ
$1.15\ 10^6\ \frac{cm^2}{V\ sec}\ K^{3/2}$	$10\ \frac{cm^2}{V\ sec}$	$1.0\ \frac{cm^2}{V\ sec}$	$5\ 10^3\ \frac{cm^2}{V\ sec}$	222^o K

Tabelle 3: Experimentelle Werte für die verschiedenen Bandmechanismen für KI aus /36/.

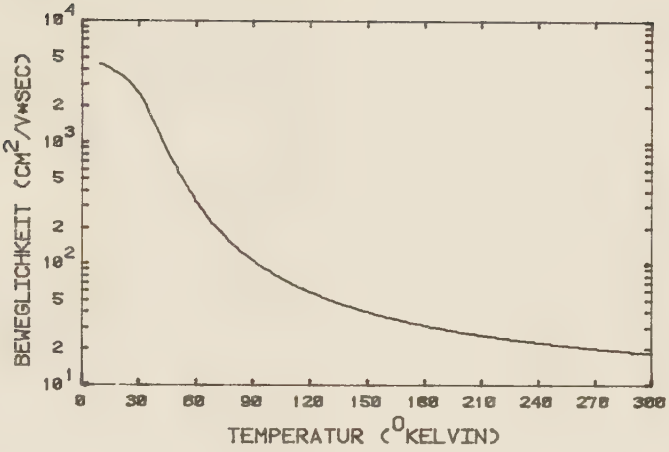


Abb. 7: Elektronenbeweglichkeit für KI bei $n_s = 7.5\ 10^{16}\ cm^{-3}$ nach /36/

11. Stoßionisations-Prozesse ($F^* \longrightarrow c$), ($F' \longrightarrow c$) und ($F \longrightarrow c$)

Mit den Erörterungen des vorigen Abschnitts und den Definitionen (6.51) und (6.40) lassen sich die Übergangswahrscheinlichkeiten für die zu beschreibenden Prozesse, bei denen jeweils ein Zentrum über die Coulombwechselwirkung mit einem anderen Leitungsbandelektron ionisiert wird, durch den folgenden Ausdruck berechnen:

$$W^{SI}(c,i) = \sum_{k,\bar{k}} \sum_{k'} \sum_{x} W^{SI}_{k',k,\bar{k}}(x \| c, \begin{matrix} F \\ F' \end{matrix}) f'(k', E^{ex}) g(k) \tag{11.1}$$

Da die Größen $W^{SI}_{k',k,\bar{k}}(x \| c, \begin{matrix} F \\ F' \end{matrix})$ unabhängig vom Ort der jeweiligen Störelektronen sind, reduziert sich (11.1) mit der Normierung (6.36), (6.37) und der Definition

$$I^{SI}_i(k' k \bar{k}) := \left| \langle \psi_c(x,k)\, \psi_c(x',\bar{k}) \,|\, e^2 C(x,x') \,|\, \psi_i(x)\, \psi_c(x',k') \rangle - \right.$$
$$\left. - \langle \psi_c(x,k)\, \psi_c(x',\bar{k}) \,|\, e^2 C(x,x') \,|\, \psi_i(x')\, \psi_c(x,k') \rangle \right|^2 \tag{11.2}$$

wobei $i = F, F^*, F'$

$$ph(m,T,\alpha_i) := \sum_{m'} \vartheta(m,T,\alpha_{i\to c})\, \vartheta(m-m',T,\alpha_{c\to c}) \quad ^{1)} \tag{11.3}$$

auf

$$W^{SI}(c,i) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k k' \bar{k}} \sum_{m} I^{SI}_i(k',k,\bar{k})\, ph(m,T,\alpha_{i\to c})\, f'(k', E^{ex}) \cdot$$
$$\cdot \delta_\gamma \left(U_i + \frac{\hbar}{2m^*}\left[k'^2 - k^2 - \bar{k}^2\right] - m\hbar\omega^0 \right) . \tag{11.4}$$

---

1) Die ϑ-Funktionen enthalten die jeweiligen Huang-Rhys-Faktoren der betrachteten Übergänge, die durch $\alpha_{i\to c}$ angedeutet sind.

Die Wellenfunktionen für (11.2) sind in (8.3) - (8.5) und (9.4) bereits vorgegeben. Ersetzen wir die k-Summationen gemäß (8.13) durch eine Integration, wird aus (11.4) mit einer scharfen Deltafunktion (da $\gamma \ll \hbar\omega^0$ ist):

$$W^q(c,i) = \frac{1}{4\pi^6\hbar}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \int_0^{E'} \sum_{m \le m''_{0i}} \left\{ \left(E'\bar{E}\left(U_i + E' - \bar{E} - m\hbar\omega^0\right)\right)^{1/2} \cdot \right.$$

$$\left. \cdot \bar{I}_i^{SI}(k'(E'), \vartheta)\, ph(m, T, \alpha_{i\to c}) \right\} f_i^1(E', E^{ex})\, d\bar{E}\, dE' \qquad (11.5)$$

mit $\quad m''_{0i} := \left[\frac{U_i + E' - \bar{E}}{\hbar\omega^0} \right]$.

Die Winkelintegration wurde ebenfalls schon ausgeführt und in den elektronischen Matrixelementen $\bar{I}_i^{SI}$ und den winkelunabhängigen Verteilungsdichten f_i^1 zusammengefaßt.

Die Auswertungen dieser Größen befinden sich in Anhang D. Um die numerischen Rechnungen erträglich zu gestalten, approximieren wir dabei die beiden Leitungsbandendzustände in (11.2) durch konstante Funktionen /3/ und legen das elektrische Feld in z-Richtung.

Wir übernehmen aus Anhang D die Endergebnisse:

$$\bar{I}_{\mp}^{SI}(k', E^{ex}) = \left(4\pi |F_0(k')|^2 + |G_0(k')|^2\right) \frac{\sinh(\beta\hbar v_\vartheta k')}{\beta\hbar v_\vartheta k'} + 2|G_0(k')|^2 \left(\left[1 - \frac{3}{(\beta\hbar v_\vartheta k')^2}\right] \cdot \right.$$

$$\left. \cdot \frac{\sinh(\beta\hbar v_\vartheta k')}{\beta\hbar v_\vartheta k'} - 3\,\frac{\cosh(\beta\hbar v_\vartheta k')}{\beta\hbar v_\vartheta k'} \right) \qquad (11.6)$$

$$\bar{I}_{\mp}^{SI}(k', E^{ex}) = 4\pi |F_1(k')|^2 \frac{\sinh(\beta\hbar v_\vartheta k')}{\beta\hbar v_\vartheta k'} \qquad (11.7)$$

$$\bar{I}_{\mp'}^{SI}(k', E^{ex}) = 4\pi |F_2(k')|^2 \frac{\sinh(\beta\hbar v_\vartheta k')}{\beta\hbar v_\vartheta k'} \qquad (11.8)$$

$$f_i^1(k'(E)_i, E^{\alpha}) = \frac{1}{n_0'} \exp\left[-\beta\left(\frac{\hbar k'^2}{2m^*} + \frac{m^*(\mu E^{\alpha})^2}{2}\right)\right], \quad i = F, F^*, F' \qquad (11.9$$

Die in (11.6) - (11.8) vorkommenden Funktionen F_o, F_1, F_2 und G_o sind in Anhang D definiert. Da ihre Berechnungen sehr ähnlich verlaufen, haben wir einen allgemeinen Ausdruck entwickelt und für numerische Rechnungen auch programmiert, so daß sie sukzessive erhalten werden können. Wir wollen die Ergebnisse hier nicht angeben, sondern verweisen auf Anhang D.

In (11.5) kann leider die Integration mit der Summation über die beteiligten Phononen nicht vertauscht werden, da die Summationsgrenzen von den Integrationsvariablen abhängen. Um den Aufwand der weiteren Auswertung von (11.5) nicht zu groß werden zu lassen, führen wir die restlichen zwei Integrationen numerisch aus. Dazu geben wir in Anhang D das Verfahren und die Rechenprogramme an.

Als Ergebnisse dieser Rechnungen erhalten wir die in den Tabellen 4, 5 und 6 angegebenen numerischen Werte für die Übergangswahrscheinlichkeiten (11.5) als Funktion der Temperatur und des äußeren elektrischen Feldes. Der besseren Übersicht wegen seien sie graphisch in der Abbildung 9 als Funktion des elektrischen Feldes und des Parameters Temperatur dargestellt, während die Abbildungen 8, 10 und 11 den umgekehrten Fall zeigen.

Aus Tabelle 6 und Abbildung 11 ist zu entnehmen, daß der Stoßionisationsprozeß mit dem F-Grundzustand auch bei höheren Feldern um $10^6 \frac{V}{m}$ zu vernachlässigen ist. Dies war im voraus zu erwarten, denn die durch das Feld entstehende Energieverteilung der "stoßenden" Leitungsbandelektronen reichen bei weitem nicht aus, die große Energiedifferenz von 1.875 eV vom Grundzustand bis zur Leitungsbandunterkante zu liefern. Die Abbildung 11 zeigt auch, daß dieser Prozeß erst bei höheren Temperaturen "wahrscheinlich" wird, obwohl bei tiefen Temperaturen energiereichere Elektronen im Leitungsband zur Verfügung stehen. Diese Gegebenheit liegt bei den beiden anderen Übergängen nicht mehr vor. Dort ist bei tiefen Temperaturen eine wesentliche Abhängigkeit vom äußeren elektrischen Feld vorzufinden.

Elektrisches Feld (V/M)

Temperatur (^{o}K)	0.0	3.10^{5}	8.10^{5}	10^{6}
10	$1.8\ 10^{-65}$	$7.9\ 10^{-39}$	$9.4\ 10^{-10}$	$9.7\ 10^{-7}$
30	$6.4\ 10^{-28}$	$1.6\ 10^{-26}$	$7.6\ 10^{-16}$	$3.8\ 10^{-13}$
50	$4.4\ 10^{-20}$	$1.3\ 10^{-19}$	$6.9\ 10^{-19}$	$1.6\ 10^{-18}$
70	$1.4\ 10^{-16}$	$3.1\ 10^{-16}$	$3.7\ 10^{-16}$	$4.2\ 10^{-16}$
120	$1.1\ 10^{-12}$	$2.2\ 10^{-12}$	$2.2\ 10^{-12}$	$2.2\ 10^{-12}$
150	$1.5\ 10^{-11}$	$3.0\ 10^{-11}$	$3.0\ 10^{-11}$	$3.0\ 10^{-11}$
200	$2.3\ 10^{-10}$	$4.5\ 10^{-10}$	$4.5\ 10^{-10}$	$4.5\ 10^{-10}$
250	$1.2\ 10^{-9}$	$2.4\ 10^{-9}$	$2.4\ 10^{-9}$	$2.4\ 10^{-9}$
300	$3.9\ 10^{-9}$	$7.8\ 10^{-9}$	$7.8\ 10^{-9}$	$7.8\ 10^{-9}$

Tabelle 4: Stoßionisationswahrscheinlichkeit $W^{SI}(c,F^{*})$ nach (11.5) für KI in $[cm^3/sec]$

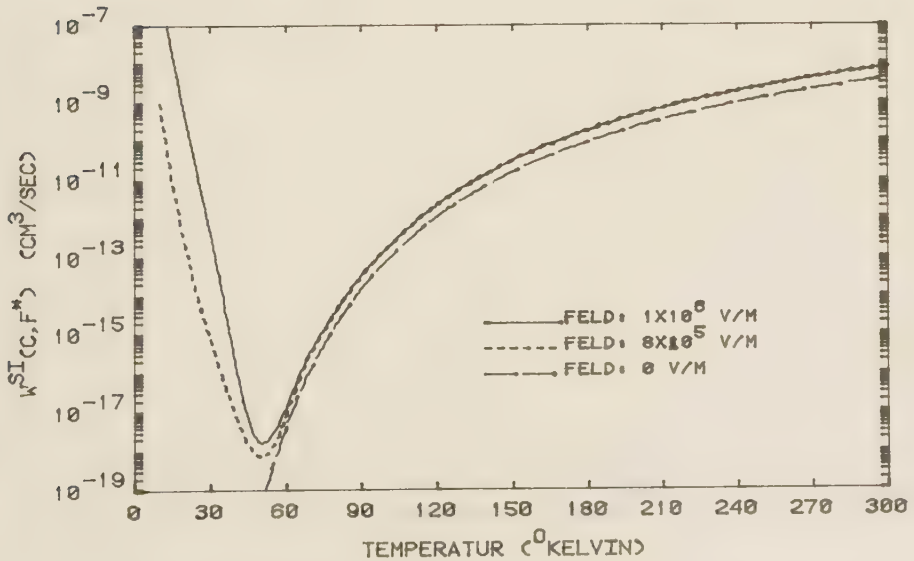


Abb. 8: Stoßionisationswahrscheinlichkeit $W^{SI}(c,F^{*})$ über der Temperatur

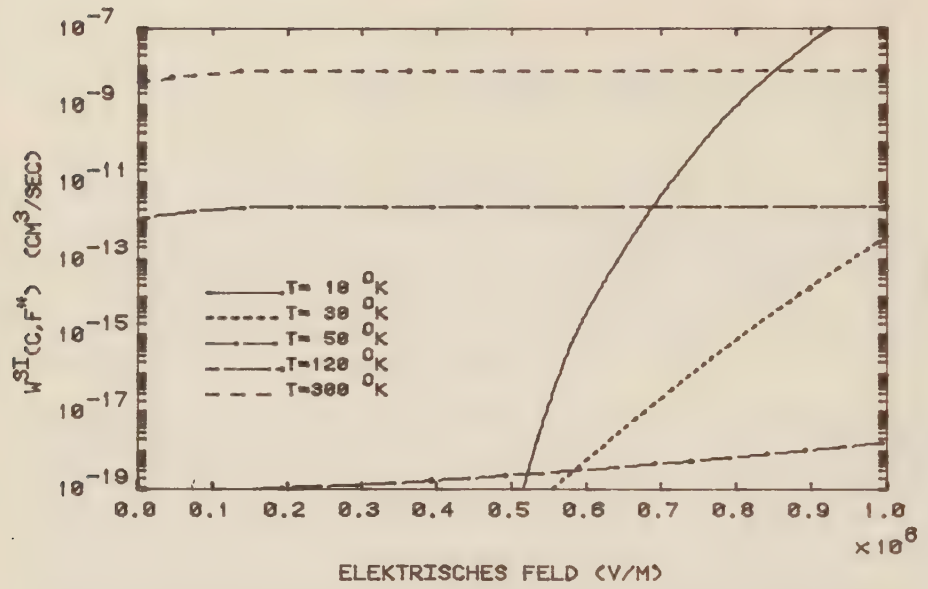


Abb. 9: Stoßionisationswahrscheinlichkeit $W^{SI}(c,F^*)$ über dem elektrischen Feld

Elektrisches Feld (V/m)

Temperatur (°K)	0.0	$3\ 10^5$	$6\ 10^5$	$1\ 10^7$
10	0.0	0.0	$1.2\ 10^{-114}$	$1.3\ 10^{-33}$
30	$1.1\ 10^{-68}$	$7.4\ 10^{-59}$	$1.1\ 10^{-48}$	$9.3\ 10^{-36}$
50	$9.2\ 10^{-45}$	$1.0\ 10^{-43}$	$2.4\ 10^{-42}$	$3.2\ 10^{-40}$
70	$1.8\ 10^{-34}$	$4.2\ 10^{-34}$	$6.2\ 10^{-34}$	$1.3\ 10^{-33}$
120	$1.3\ 10^{-23}$	$2.7\ 10^{-23}$	$2.7\ 10^{-23}$	$2.8\ 10^{-23}$
150	$1.7\ 10^{-20}$	$3.3\ 10^{-20}$	$3.4\ 10^{-20}$	$3.4\ 10^{-20}$
200	$2.2\ 10^{-17}$	$4.5\ 10^{-17}$	$4.5\ 10^{-17}$	$4.5\ 10^{-17}$
250	$1.8\ 10^{-15}$	$3.7\ 10^{-15}$	$3.8\ 10^{-15}$	$3.8\ 10^{-15}$
300	$3.7\ 10^{-14}$	$7.4\ 10^{-14}$	$7.4\ 10^{-14}$	$7.4\ 10^{-14}$

Tabelle 5: Übergang $W^{SI}(c,F')$ nach (11.5) für KI in $[cm^3/sec]$

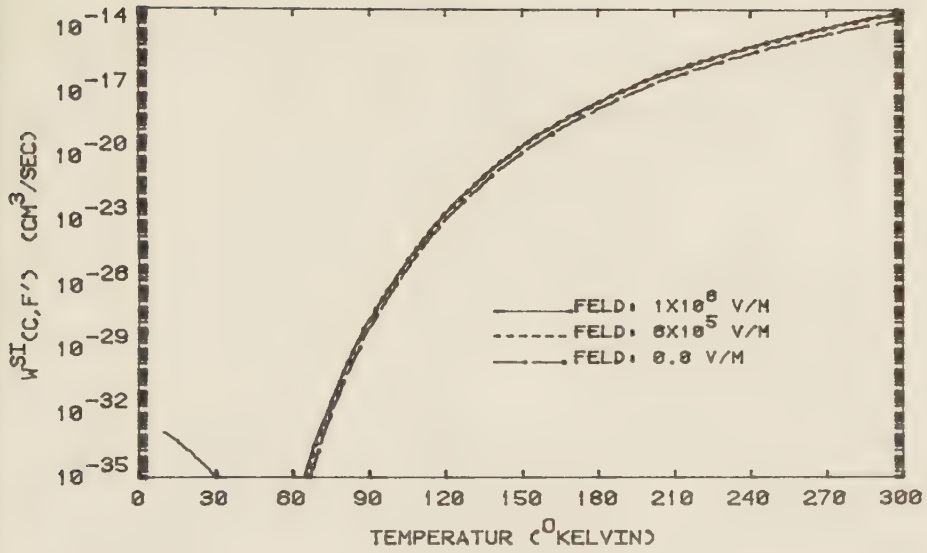


Abb. 10: Übergang $W^{SI}(c,F')$ in KI

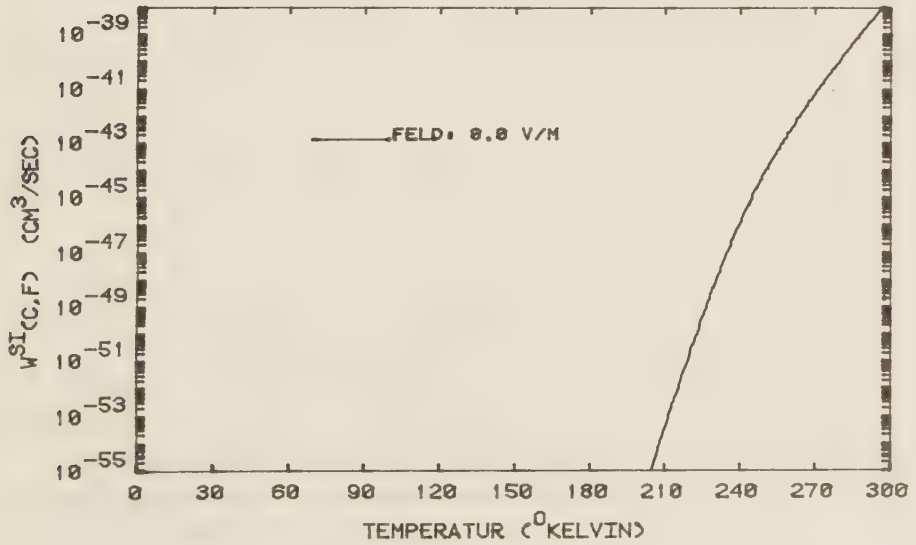


Abb. 11: Übergang $W^{SI}(c,F)$ in KI

Elektrisches Feld (V/m)

Temperatur (^{o}K)		0.0	1.10^{6}
	0 - 120	0.0	0.0
	150	$2.1\ 10^{-106}$	$5.2\ 10^{-106}$
	200	$3.6\ 10^{-57}$	$7.3\ 10^{-57}$
	250	$8.6\ 10^{-45}$	$1.7\ 10^{-44}$
	300	$2.4\ 10^{-38}$	$4.8\ 10^{-38}$

Tabelle 6: Übergang $W^{SI}(c,F)$ für KI in $\left[cm^3/sec\right]$

Bei der Beteiligung des F^{x} -Zentrums ist dieses Verhalten besonders ausgeprägt. Wie Abbildung 10 für das F'-Zentrum zeigt, liegt für dieses ein ähnliches, aber nicht so ausgeprägtes Verhalten bei äußerem Feld vor. Wir betrachten aus diesem Grund das erstere genauer. Nach Abbildung 8 und 9 bzw. Tabelle 4 liegt im Temperaturbereich über 60^{o} K keine wesentliche Abhängigkeit vom elektrischen Feld vor. Im Feldstärkebereich von 0 bis 10^{6} V/m bleibt bei konstanter Temperatur die Übergangswahrscheinlichkeit $W^{SI}(c,F^{x})$ relativ gleich. Diese Tatsache ändert sich unterhalb 60^{o} K schlagartig. In diesem Bereich variiert die Wahrscheinlichkeit bezüglich des Feldes über Zehnerpotenzen (Abb. 9). Hinzu kommt, daß die Übergangswahrscheinlichkeit in diesem Temperaturbereich bei zunehmendem Feld selbst wieder zunimmt und eine Größenordnung von $10^{-7}\ \frac{cm^3}{sec}$ bei einem äußeren Feld von $10^{6}\ \frac{V}{m}$ annimmt.

Wie aus Abbildung 8 zu ersehen ist, finden wir im Temperaturverhalten dieses Prozesses bei äußeren Feldern von mehr als $5 \cdot 10^{5}\ \frac{V}{m}$ Minima bei ca. 50^{o} K vor. Beim Zustandekommen dieser Minima müssen einerseits die Energieverteilung der Leitungsbandelektronen und andererseits die Beteiligung der Phononen mit ihrer "globalen" Resonanzstruktur in Betracht gezogen werden. Leider sind uns keine experimentelle Daten dieses Prozesses für KI aus der Literatur bekannt, aber ein Vergleich mit vergleichbaren Störzentren-Energietiefen unterhalb vom Leitungsband in Ge und Si zeigen eine ähnliche Größenordnung von

(a) $10^{-9}\ \frac{cm^3}{sec}$: für S (E_c -0.275 eV) in Ge bei 82° K und einer Feldstärke von $10^6\ \frac{V}{m}$ /29/ ,

(b) $10^{-7} - 10^{-9}\ \frac{cm^3}{sec}$: für In, Ni, Au in Si bei 65 - 200° K und Feldern der Größe $10^5 - 10^6\ \frac{V}{m}$ /30/ .

12. Auger-Rekombinationsprozesse (c→F*), (c→F) und (c→F')

Um eine einigermaßen geschlossene Reaktionskinetik für Augerprozesse untersuchen zu können, sollten wir auch die Umkehrübergänge zu den "Stoßionisations"-Prozessen behandeln. Dazu erinnern wir uns an die Definitionen (6.3) - (6.5), (6.34) und (6.50).

Da in diesem Fall die durch (4.39) definierten Frößen $W^{AR}_{k',k'',k}(x \| i,c)$ wiederum von den Orten x der Störstellen unabhängig sind, gewinnen wir mit dem Phononen- (11.3) und dem jeweiligen Elektronenanteil

$$I_i^{AR}(k',k'',k) := \left| \langle \psi_i(x)\, \psi_c(x',k') \,|\, e^2 C(x,x') \,|\, \psi_c(x,k')\, \psi_c(x',k'') \rangle - \right.$$
$$\left. - \langle \psi_i(x)\, \psi_c(x',k') \,|\, e^2 C(x,x') \,|\, \psi_c(x',k'')\, \psi_c(x,k'') \rangle \right|^2 \qquad (12.1)$$
$$i = F, F^*, F'$$

folgenden Ausdruck für die Übergangswahrscheinlichkeiten:

$$W^{AR}(i,c) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k',k'',k} \sum_{m} I_i^{AR}(k',k'',k)\, ph(m,T,\alpha_{c-i})\, f'(k',E^{ex})\, f(k'',E^{ex}) \cdot$$
$$\cdot \delta_\gamma \left(\frac{\hbar}{2m^*}\left[k'^2 + k''^2 - k^2\right] - U_i - m\hbar\omega^0 \right). \qquad (12.2)$$

Approximieren wir erneut die Lorentzfunktion δ_γ durch eine Deltafunktion und ersetzen die k-Summationen durch Integrale gemäß (8.13), schreibt sich (12.2) nach einer Integration über E' und allen Winkelintegrationen

$$W^{AR}(i,c) = \frac{1}{4\pi^2\hbar}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \int_0^E \sum_{m \geq m_{0i}^m} \left\{ \left(E\,E''\,(E + U_i + m\hbar\omega^0 - E'') \right)^{1/2} \bar{I}_i^{AR}(k(E)) \cdot \right.$$
$$\left. \cdot ph(m,T,\alpha_{c-i})\, f'^2\left(k'(E + U_i + m\hbar\omega^0 - E'), E^{ex}\right) f^2\left(k''(E''), E^{ex}\right) \right\} dE''\, dE \qquad (12.3)$$

mit $m'''_{o_i} := \left[\frac{E''-E-U_i}{\hbar\omega^o} \right]$

und dem in Anhang H berechneten elektronischen Anteil in der Näherung (D.2):

$$\bar{I}_F^{AR}(K(E)) = 4\pi \left| F_1(K) \right|^2$$

$$\bar{I}_{F^*}^{R}(K(E)) = 4\pi \left| P_o(K) \right|^2 + \left| Q_o(K) \right|^2 \qquad (12.4)$$

$$\bar{I}_{F'}^{AR}(K(E)) = 4\pi \left| F_2(K) \right|^2 .$$

Die Funktionen $P_o(K)$ und $Q_o(K)$ sind in (H.4) angegeben.

Die neuen winkelunabhängigen Verteilungsdichten f^2 schreiben sich gemäß

$$f^2(k(E), E^{ex}) := \frac{1}{n_o'} \frac{\sinh(\beta\hbar v_g k)}{\beta\hbar v_g k} e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*(\mu E^{ex})^2\right)} \qquad (12.5)$$

Dabei ist natürlich $K(E) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m^* E}$.

Wie bei den Stoßionisationswahrscheinlichkeiten (11.5) lassen sich die beiden Integrationen über E'' bzw. E in (12.3) wegen der Summationsgrenze $m'''_{o_i}(E,E'')$ nicht leicht ausführen. Wir berechnen des Auswertungsumfangs von (12.3) wegen diese Integrale auf numerische Art.

Wir wollen hier noch den feldfreien Fall betrachten. Dabei reduziert sich die Verteilung (12.5) auf die "reine" Boltzmannverteilung (10.5). So läßt sich die Übergangswahrscheinlichkeit (12.3) wegen

$$f\left(k'(E+U_i+m\hbar\omega^o-E'')\right) = \frac{1}{n_o} e^{-\beta(U_i+m\hbar\omega^o)} e^{-\beta(E-E'')} \qquad (12.6)$$

auf die Gestalt

$$W^{AR}(i,c) = \frac{1}{4\pi^2\hbar}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{1}{n_o}\int_0^\infty\int_0^E \sum_{m\geq m'''_{o_i}} \left\{ e^{-\beta(U_i+m\hbar\omega^o)} \left(EE''(E+U_i+m\hbar\omega^o-E'')\right)^{1/2} \times \right. \qquad (12.7)$$

$$\left. \times \bar{I}_i^{AR}(k(E))\, ph(m, T, \alpha_{c-i})\, f(k(E)) \right\} dE''\, dE$$

umschreiben. Um eine Verbindung zu den Umkehrprozessen herzustellen, ersetzen wir m durch (-m) . Dadurch erhalten wir:

$$W^{AR}(i,c) = \frac{1}{4\pi^6\hbar}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{1}{n_o}\int_0^{\bar{m}_o''}\int_0^{E}\sum_{m\le\bar{m}_o''}\left\{e^{-\beta(U_i-m\hbar\omega^\circ)}\left(EE''(E+U_i-m\hbar\omega^\circ-E'')\right)^{1/2}\cdot\right.$$
$$\left.\cdot\,\bar{I}_i^{AR}(k(E))\,ph(m,T,\alpha_{c\to i})\,f(k(E))\right\}dE''\,dE \qquad (12.8)$$

mit $\bar{m}_o'' := \left[\frac{E+U_i-E}{\hbar\omega^\circ}\right]$.

Diese Darstellung ist wohl sehr ähnlich derer von Stoßionisationswahrscheinlichkeiten. Wegen der Phononenbeteiligung an den Übergängen geht aber eine Beziehung der Form

$$\frac{W^{SI}(c,i)}{W^{AR}(i,c)} = n_o e^{-\beta U_i} \qquad (12.9)$$

verloren, ist jedoch ohne Phononenbeteiligung gegeben.

Die Ergebnisse unserer numerischen Rechnungen sind in den Tabellen 7, 8 und 9 zusammengefaßt und deren Temperaturverhalten in den Abbildungen 12, 13 und 14 graphisch dargestellt.

Elektrisches Feld (V/m)

Temperatur °K	0.0	5.10^5	10^6
10	$8.2\ 10^{-25}$	$6.9\ 10^{-22}$	$1.1\ 10^{-22}$
30	$6.1\ 10^{-25}$	$3.6\ 10^{-23}$	$4.7\ 10^{-22}$
50	$7.8\ 10^{-25}$	$3.8\ 10^{-24}$	$6.2\ 10^{-24}$
70	$1.1\ 10^{-24}$	$4.4\ 10^{-24}$	$4.6\ 10^{-24}$
90	$1.4\ 10^{-24}$	$5.5\ 10^{-24}$	$5.6\ 10^{-24}$
150	$1.1\ 10^{-24}$	$8.3\ 10^{-24}$	$8.3\ 10^{-24}$
200	$2.4\ 10^{-24}$	$9.6\ 10^{-24}$	$9.6\ 10^{-24}$
250	$2.6\ 10^{-24}$	$1.1\ 10^{-23}$	$1.1\ 10^{-23}$
300	$2.7\ 10^{-24}$	$1.1\ 10^{-23}$	$1.1\ 10^{-23}$

Tabelle 7: $W^{AR}(F^*,c)$ für KI in $[cm^6/sec]$

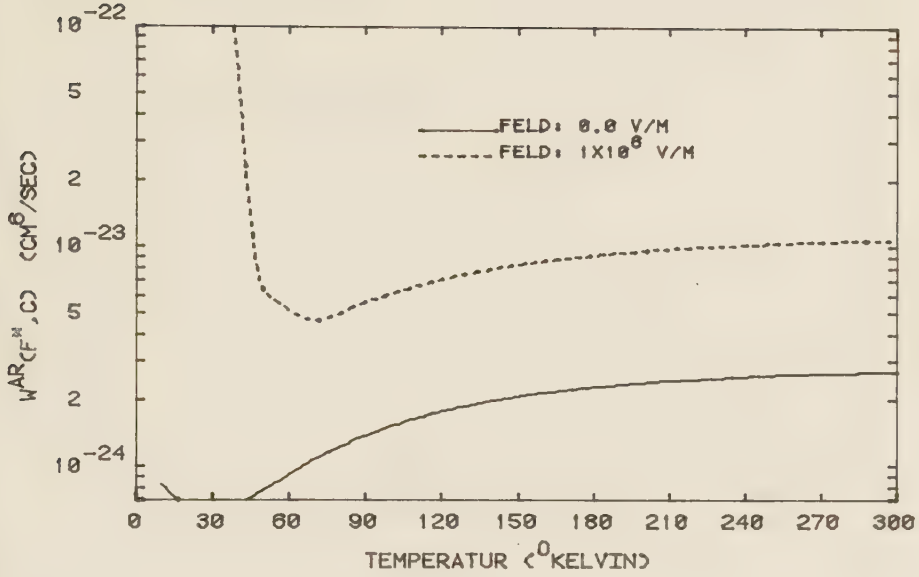


Abb. 12: Auger-Rekombination $W^{AR}(F^{*},c)$

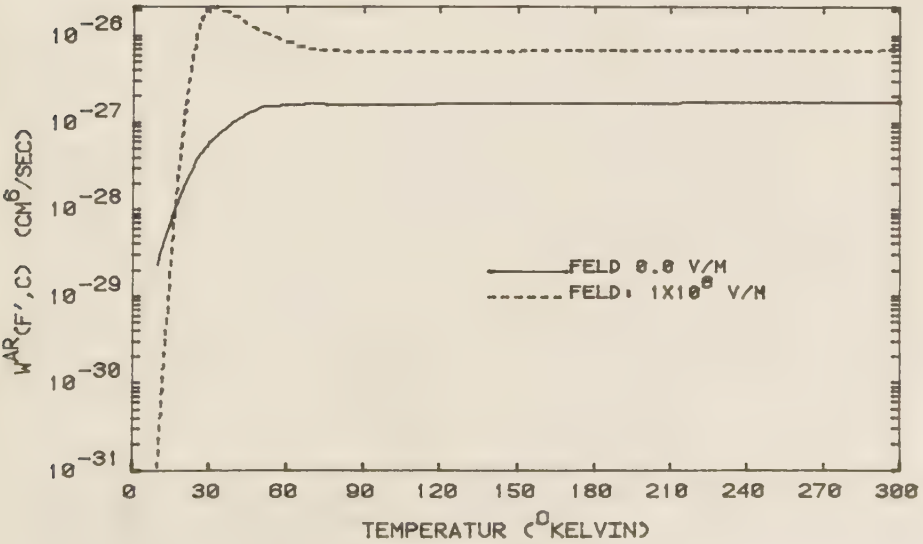


Abb. 13: Auger-Rekombination $W^{AR}(F',c)$

Elektrisches Feld (V/m)

	0.0	5.10^5	10^6
10	$2.3\ 10^{-29}$	$1.5\ 10^{-27}$	$1.1\ 10^{-31}$
30	$5.8\ 10^{-28}$	$1.9\ 10^{-26}$	$2.2\ 10^{-26}$
50	$1.5\ 10^{-27}$	$7.1\ 10^{-27}$	$1.1\ 10^{-26}$
70	$1.6\ 10^{-27}$	$6.7\ 10^{-27}$	$7.0\ 10^{-27}$
90	$1.6\ 10^{-27}$	$6.5\ 10^{-27}$	$6.6\ 10^{-27}$
150	$1.7\ 10^{-27}$	$6.7\ 10^{-27}$	$6.7\ 10^{-27}$
200	$1.7\ 10^{-27}$	$6.8\ 10^{-27}$	$6.8\ 10^{-27}$
250	$1.7\ 10^{-27}$	$6.8\ 10^{-27}$	$6.8\ 10^{-27}$
300	$1.7\ 10^{-27}$	$6.9\ 10^{-27}$	$6.9\ 10^{-27}$

Tabelle 8: $W^{AR}(F',c)$ für KI in $\left[cm^6/sec\right]$

Elektrisches Feld (V/m)

	0.0	5.10^5	1.10^6
10	$7.9\ 10^{-51}$	$6.9\ 10^{-61}$	$1.2\ 10^{-131}$
30	$8.8\ 10^{-50}$	$3.4\ 10^{-49}$	$1.4\ 10^{-54}$
50	$6.3\ 10^{-48}$	$2.8\ 10^{-47}$	$3.5\ 10^{-47}$
70	$1.6\ 10^{-44}$	$6.5\ 10^{-44}$	$6.6\ 10^{-44}$
90	$3.3\ 10^{-40}$	$1.3\ 10^{-39}$	$1.3\ 10^{-39}$
150	$6.3\ 10^{-32}$	$2.5\ 10^{-31}$	$2.5\ 10^{-31}$
200	$1.3\ 10^{-28}$	$5.4\ 10^{-28}$	$5.4\ 10^{-28}$
250	$5.6\ 10^{-27}$	$2.2\ 10^{-26}$	$2.2\ 10^{-26}$
300	$2.8\ 10^{-26}$	$1.1\ 10^{-25}$	$1.1\ 10^{-25}$

Tabelle 9: $W^{AR}(F,c)$ für KI nach der Formel (12.3) in $\left[cm^6/sec\right]$.

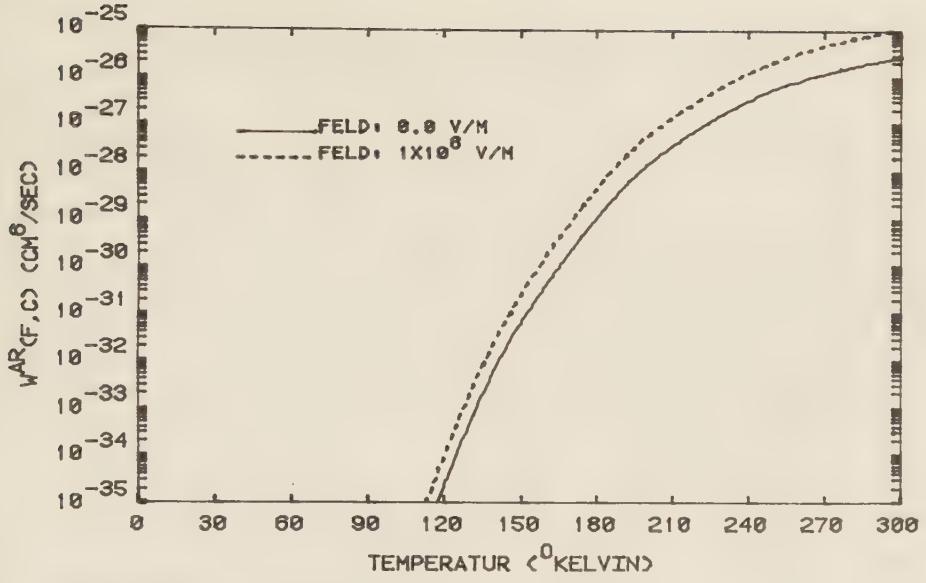


Abb. 14: Auger-Rekombination $W^{AR}(F,c)$

Wie die Tabellen 7, 8, 9 ausweisen bzw. die dazugehörigen graphischen Darstellungen zeigen, liegt bei diesen Auger-Rekombinationen bei höheren Temperaturen eine stärkere Feldabhängigkeit als bei den Umkehrprozessen vor. Auch hier zeigt sich unterhalb 60° K eine gesteigerte Abhängigkeit der Übergangswahrscheinlichkeit vom äußeren elektrischen Feld. Bei diesen Berechnungen müssen wir aber feststellen, daß die angenommenen Approximationen der Konstanz der Anfangswellenfunktionen (D.2) bei tiefen Temperaturen und höheren Feldstärken zu grob sind. Leider waren Rechnungen ohne diese Annahmen für die numerische Auswertung zu rechenintensiv. Hierzu müssen weitere Untersuchungen vorgenommen werden. Insgesamt können wir aber feststellen, daß auch hier unsere Ergebnisse von vergleichbarer Größenordnung mit ähnlichen Halbleiterverhältnissen sind:

$10^{-26}\ \frac{cm^6}{sec}$: Cu in Ge ($E_c - 0.26$ eV)

bei Zimmertemperatur /16,40/.

Leider sind uns auch für Auger-Rekombinationen in KI mit Farbzentren keine experimentelle Daten bekannt.

13. Stationäres Nichtgleichgewicht bei äußeren Einflüssen

Zur Untersuchung des stationären Nichtgleichgewichts schränken wir unser System auf im Ionenkristall relevant vorkommende Prozesse ein. Wir wollen deshalb Stoßionisationsübergänge und Auger-Rekombinationen an F- und F'-Zentren vernachlässigen. Natürlich berücksichtigen wir nicht die ebenfalls im Reaktionssystem (6.57) - (6.60) angegebenen, aber nicht berechneten Augerübergänge. Übrig bleibt also das System:

$$\dot{n}_F = W(F,F^*)\,n_F - W(F^*,F)\,n_{F^*} - W(F',c)\,n_F\,n_L + W(c,F')\,n_{F'} \quad ^{1)}$$
$$+ W^A(F,F^*/c,F^*)\,n_{F^*}^2 + 2\,W^A(F,F^*/c,F')\,n_{F^*}\,n_{F'}$$

$$\dot{n}_{F^*} = -W(F,F^*)\,n_{F^*} + W(F^*,F)\,n_F - W(c,F^*)\,n_{F^*} + W(F^*,c)\,n_L\,n_\alpha$$
$$+ W^{AR}(F^*,c)\,n_\alpha\,n_L^2 - 2\,W^A(F,F^*/c,F^*)\,n_{F^*}^2 - W^{SE}(c,F^*)\,n_{F^*}\,n_L \qquad (13.1)$$
$$- W^A(F,F^*/c,F')\,n_{F^*}\,n_{F'}$$

$$\dot{n}_{F'} = W(F',c)\,n_F\,n_L - W(c,F')\,n_{F'} - W^A(F,F^*/c,F')\,n_{F^*}\,n_{F'}$$

$$\dot{n}_L = -W(F',c)\,n_F\,n_L + W(c,F')\,n_{F'} + W(c,F^*)\,n_{F^*} - W(F^*,c)\,n_L\,n_\alpha$$
$$- W^{AR}(F^*,c)\,n_\alpha\,n_L^2 + W^A(F,F^*/c,F^*)\,n_{F^*}^2 + W^A(F,F^*/c,F')\,n_{F^*}\,n_{F'}$$
$$+ W^{SE}(c,F^*)\,n_L\,n_{F^*}\,.$$

Mit der Neutralitätsbedingung

$$n_S = n_F + n_{F^*} + 2n_{F'} + n_L \qquad (13.2)$$

---

1) Mit der Absorptionskonstante $C_F(F^*,F)$ und der Photostromstärke $\mathcal{J}_0$ schreibt sich $W(F^*,F) = C_F(F^*,F)\cdot\mathcal{J}_0$.

läßt sich die Dimension des nichtlinearen Differentialgleichungssystems (13.1) von 4 auf 3 erniedrigen.

Den stationären Zustand unseres Systems (13.1) gewinnen wir aus der Bedingung

$$\dot{n}_F = \dot{n}_{F\uparrow} = \dot{n}_{F\downarrow} = \dot{n}_L = 0 \,. \tag{13.3}$$

Hat man diesen errechnet, erhebt sich die Frage nach seiner Stabilitätseigenschaft. Diese wollen wir vor weiteren Untersuchungen definieren und einige Bedingungen für deren Auftreten ohne Beweise angeben. Wir verweisen dazu auf Lehrbücher über Systemdynamik /42, 43,44/. Hier bezeichnen wir ein allgemeines nichtlineares System durch

$$\dot{x} = f(x,k) \qquad x \in \bar{\mathbb{R}}^m_+ \,,\; k \in \mathbb{R}^p \,,\; f : \bar{\mathbb{R}}^m_+ \times \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}^m \,. \tag{13.4}$$

Dann gelten die Definitionen:

Def. 13.1: Ein stationärer Zustand x_{st} von (13.4) wird lokal stabil genannt, falls für alle Umgebungen V von x_{st} eine Umgebung U von x_{st} existiert, so daß jede Trajektorie $x(t)$, die in U beginnt, die Umgebung V für alle Zeiten nicht verläßt.

Def. 13.2: Das System (13.4) wird in $\mathfrak{D} \in \bar{\mathbb{R}}^m_+$ global stabil genannt, wenn jede Trajektorie $x(t)$, beginnend in $\mathfrak{D}$, mit zunehmender Zeit gegen denselben stationären Zustand x_{st} strebt.

Um Aussagen über das nichtlineare System (13.4) zu erhalten, wird im allgemeinen das linearisierte System betrachtet. Durch die Transformation

$$x' := x - x_{st} \tag{13.5}$$

wird (13.4) in

$$\dot{x}' = f'(x',k) \tag{13.5}$$

übergeführt. Durch Taylorentwicklung von f' um den stationären Zustand gewinnen wir

$$\dot{x}' = A\,x' + \text{Glieder höherer Ordnung} \qquad (13.5)$$

mit

$$A_{ij} := \frac{\partial f_i(x_1 k)}{\partial x_j} \qquad \begin{matrix} 1 \le i \le \mu \\ 1 \le j \le m \end{matrix} . \qquad (13.6)$$

Für (13.5) gilt das Theorem:

Theorem 13.1: Der Nullpunkt $x' = 0$ von (13.5) ist stabil, wenn alle Eigenwerte der Matrix A negative Realteile haben, und ist instabil, wenn wenigstens ein Eigenwert positiven Realteil besitzt.

Die Voraussetzung dieser Behauptung kann wiederum durch das Hurwitz-Kriterium nachgeprüft werden /41/:

Kriterium 13.2: Damit alle Wurzeln des Polynoms $f(z) = a_o z^n + a_1 z^{n-1} + \ldots$ negative Realteile besitzen, ist es notwendig und hinreichend, daß für die Hauptminors Δ_i der Hurwitzdeterminante die Ungleichungen

$$a_o \Delta_i > 0 \quad \text{für} \quad i \quad \text{gerade}$$

$$\Delta_i > 0 \quad \text{für} \quad i \quad \text{ungerade}$$

gelten.

Zusätzlich geben wir eine weitere Bedingung für Stabilitätsuntersuchungen an.

Theorem 13.3: Eine notwendige Bedingung für lokale Stabilität eines Systems (13.5) ist, daß $\mathrm{Sp}\,A \le 0$ erfüllt ist.

Wenden wir uns nun unserem System zu. Da es äußerst schwierig ist, dieses durch (13.1) gegebene System wegen der vielen auftretenden Koeffizienten in seiner Allgemeinheit zu untersuchen, beschränken wir uns auf einige Sonderfälle. In /45,46/ wurde bereits das vereinfachte System (13.1) ohne sämtliche Augerübergänge untersucht. In beiden Arbeiten wurde die Existenz und völlige Stabilität des stationären Zustandes festgestellt. Insofern erweitern wir dieses System mit unter speziellen äußeren Bedingungen ins Spiel kommenden Augerprozessen:

(I) Als erstes untersuchen wir:

$$\dot{n}_F = W(F,F^*)\,n_{F^*} - W(F^*,F)\,n_F + W^A(F,F^*/c,F^*)\,n_{F^*}^2$$

$$\dot{n}_L = -W(F^*,c)\,n_L n_\alpha + W(F,F^*/c,F^*)\,n_{F^*}^2 \qquad (13.7)$$

mit: $n_{F^*} = n_S - n_F - n_L$

$n_\alpha = n_L$.

Es liegt also der Fall tiefer Temperatur und ausgeschalteten äußeren elektrischen Feldes vor, bei dem die Übergänge $W(c,F^*)$, $W(c,F')$, $W(F',c)$, $W^A(F,F^*/c,F^*)$, $W^{SI}(c,F^*)$ und $W^{AR}(F^*,c)$ zu vernachlässigen sind.

Der stationäre Zustand berechnet sich mit der Abkürzung

$$\xi := \left(\frac{W(F^*,c)}{W^A(F,F^*/c,F^*)}\right)^{1/2} , \qquad \eta_\pm := \frac{1\pm\xi}{1-\xi^2} \qquad (13.8)$$

zu:

$$n_L^s = (1-\xi)^{-1}(1\pm\xi)(n_S - n_F)$$

$$n_F^s = \frac{W(F^*,F)+(1-\eta_\pm)W(F,F^*)+2W^A(F,F^*/c,F^*)(1-\eta_\pm)n_S}{2W^A(F,F^*/c,F^*)(1-\eta_\pm)^2} \pm \qquad \text{für } \eta_\pm \neq 1 \qquad (13.9)$$

$$\pm\left(\frac{(W(F^*,F)+(1-\eta_\pm)W(F,F^*))^2+4W(F^*,F)W^A(F,F^*/c,F^*)(1-\eta_\pm)^2 n_S}{2W^A(F,F^*/c,F^*)(1-\eta_\pm)^2}\right)^{1/2}$$

bzw.

$$n_L^s = n_S$$

$$n_F^s = 0 \qquad \text{für} \quad \eta = 1 \; . \qquad (13.10)$$

Übernehmen wir unsere Werte für (13.8), wobei die Einteilchen-Übergangswahrscheinlichkeiten nach /46/ in Anhang I zusammengestellt sind, ergibt sich mit $\xi \ll 1$ bzw. $\eta \cong 1$ die zweite

Lösung (13.10). Die Frage nach der Stabilität dieses Zustandes beantworten uns die Theoreme (13.1) bzw. (13.3).

Nach dem Hurwitz-Kriterium (13.2) müssen für das charakteristische Polynom des linearisierten Systems A (13.7)

$$\lambda^2 - \mathrm{Sp}\,A + \det A = 0 \tag{13.11}$$

die Bedingungen

$$\mathrm{Sp}\,A < 0 \quad \text{und} \quad \det A > 0 \tag{13.12}$$

gelten.

Für die Spur von A erhalten wir:

$$\mathrm{Sp}\,A = \left[W^A(F,F^*/c,F^*) - W(F^*,c) \right](2n_s - 1) .$$

Da mit der obigen Begründung die Differenz $W^A(F,F^*/c,F^*) - W(F^*,c)$ größer 0 ergibt, haben wir den Fall $\mathrm{Sp}\,A > 0$ vorliegen und somit keine Stabilität.

Aus dem Resultat (13.10) können wir unschwer entnehmen, daß das durch (13.7) beschriebene System eines Halogenid-Kristalls mit Farbzentren physikalisch unrealistisch ist. Wir modifizieren aus diesem Grund (13.7) durch Einführung von zusätzlichen α -Zentren gemäß

$$n_\alpha = n_L + n_\alpha^0 . \tag{13.13}$$

Aus Photoleitfähigkeitsexperimenten /48/ in Alkalihalogenid-Kristallen läßt sich diese Modifizierung dadurch rechtfertigen, daß zusätzlich α -Zentren (Schottky-Fehlstellen) durch die Herstellung des Halbleiters auftreten.

Wir erhalten jetzt ein realistisches Bild unseres Systems, dafür werden die Lösungen der Gleichung (13.7) komplizierter. Mit den Definitionen

$$\xi' := \frac{W(F^*;c)\, n_\alpha^\circ}{W^A(F,F^*/c,F^*) - W(F^*;c)} \tag{13.14}$$

$$\eta' := \frac{W^A(F,F^*/c,F^*)}{W^A(F,F^*/c,F^*) - W(F^*;c)}$$

schreibt sich der stationäre Zustand der Leitungsbandelektronen

$$n_L^s = \tfrac{1}{2}\xi' + \eta'(n_s - n_F) \pm \left(\left[\tfrac{1}{2}\xi' + \eta'(n_s - n_F) \right]^2 - 4\eta'(n_s - n_F)^2 \right)^{1/2} . \tag{13.5}$$

Da in unserem Fall $\eta' \cong 1$ ist, verändert sich das obige Resultat nur geringfügig. Der F-Zentrenzustand muß gleichzeitig die quadratische Gleichung

$$n_F^2 - \left[\frac{W(F,F^*) + W(F^*F)}{W^A(F,F^*/c,F^*)} + 2(n_s - n_L^s) \right] n_F + \left[\frac{W(F,F^*)}{W^A(F,F^*/c,F^*)} (n_s - n_L^s) + (n_s - n_L^s)^2 \right] = 0 \tag{13.16}$$

erfüllen, und eine [1] der Stabilitätsbedingungen lautet für das veränderte System:

$$n_L^s < \tfrac{1}{2} n_s . \tag{13.17}$$

Zusätzlich muß natürlich der Zustand n_L^s in (13.15) reell und im Bereich $0 \leq n_L^s \leq n_s + n_\alpha^\circ$ liegen. Das liefert uns die weitere Einschränkung

$$\left[12(n_s - n_F) - 4\xi' \right] (n_s - n_F) \leq \xi'^2 . \tag{13.18}$$

Ebenso gelten für die Lösungen der Gleichung (13.16) dieselben Bedingungen.

---

[1] Die weitere Bedingung schreibt sich in einem länglichen Ausdruck und wird deswegen weggelassen.

Mit dieser Modifizierung erhalten wir somit ein den physikalischen Gegebenheiten angepaßtes System mit einem stationären Nichtgleichgewichtszustand unter mehreren Nebenbedingungen. Leider läßt sich die Lösung dieses Systems nicht in analytischer Form darstellen. Wir sehen aber aus (13.15), daß wir über den Parameter ξ' eine Steuerung unseres Systems vornehmen können. Als Abschluß sei aber nochmals betont, daß durch die Mitnahme von zusätzlichen α -Zentren ein sinnvolles Resultat in der Reaktionskinetik zu erwarten ist. Diese Tatsache wollen wir uns im weiteren zunutze machen. Es sei hier auch angemerkt, daß in /57,48/ ähnliche Überlegungen angestellt wurden.

(II) Unser zweites zu untersuchendes System erhalten wir im Fall tiefer Temperatur und niedriger Störstellenkonzentration, so daß wir den Übergang $W^{A}(F,F^{*}/c,F^{*})$ diesmal vernachlässigen. Dafür nehmen wir aus (13.1) die beiden feldabhängigen Übergänge der Auger-Stoßionisation und Rekombination des F^{*} -Zentrums mit:

$$
\begin{aligned}
\dot{n}_{F} &= -W(F^{*},F)\,n_{F} + W(F,F^{*})\,n_{F^{*}} \\
\dot{n}_{L} &= -W(F^{*},c)\,n_{L}\,n_{L} - W^{AR}(F^{*},c)\,n_{L}^{2}\,n_{L} + W^{SI}(c,F^{*})\,n_{F^{*}}\,n_{L} \\
\text{mit:}\quad & n_{F^{*}} = n_{S} - n_{F} - n_{L} \\
& n_{L} = n_{L} + n_{L}^{0} \quad .
\end{aligned}
\tag{13.19}
$$

Zu diesem System müssen wir eine Bemerkung anbringen. Da der Übergang $W^{SI}(c,F^{*})$ nach Abschnitt 11 erst bei höheren Feldern Beiträge in den obigen Gleichungen liefert, müßten wir der Korrektheit wegen einen zusätzlichen Übergang vom F^{*} -Zentrum ins Leitungsband hinzufügen, nämlich den Feldionisationsprozeß (Tunnell-Effekt). Da wir aber qualitative Aussagen zum System machen wollen, vernachlässigen wir diesen und bauen ihn nachträglich in unsere Gleichungen ein (siehe unten).

In /46/ wurde das System (13.19) eingehend untersucht. Wir verzeichnen deshalb hier die Ergebnisse aus /46/:

(a) Im Fall keiner zusätzlichen Schottky-Defekte ($n_\alpha^\circ = 0$) haben wir ein völlig stabiles System vorliegen. Der stationäre Zustand läßt sich wie im Teil (I) berechnen.

(b) Nimmt man aber den physikalisch realistischeren Fall $n_\alpha^\circ \neq 0$ an, gewinnt man für die Leitungsbandelektronen zwei Lösungen:

$$n_L^s = 0 \qquad \text{als triviale Lösung} \tag{13.20}$$

$$n_L^s = \frac{W(\bar{F}^*c)+W^{AD}(\bar{F}^*c)n_\alpha^\circ+\gamma''W^{SI}(c,F^*)}{2W^{AD}(\bar{F}^*c)}\left\{\left(1+\frac{4W^{AD}(\bar{F}^*c)\left[\gamma''W^{SI}(c,F^*)n_s-W(\bar{F}^*c)\,n_\alpha^\circ\right]}{\left[W(\bar{F}^*c)+W^{AD}(\bar{F}^*c)n_\alpha^\circ+\gamma''W^{SI}(c,F^*)\right]^2}\right)^{1/2}-1\right\} \tag{13.21}$$

$$\text{für } W^{SI}(c,F^*) > W(\bar{F}^*c)\,\frac{n_\alpha^\circ}{n_s}\,\frac{1}{\gamma''}$$

mit $\gamma'' := \left(1+\frac{W(\bar{F}^*F^*)}{W(\bar{F}^*\bar{F})}\right)$.

Die Stabilität der Null-Lösung (13.20) erfordert die zusätzliche Bedingung

$$W^{SI}(c,F^*) \leq W(\bar{F}^*c)\,\frac{n_\alpha^\circ}{n_s}\left(1+\frac{W(\bar{F}^*F^*)}{W(\bar{F}^*\bar{F})}\right), \tag{13.22}$$

während für den Zustand (13.21) die im Einklang mit (13.21) reziproke Forderung erfüllt werden muß:

$$W^{SI}(c,F^*) > W(\bar{F}^*c)\,\frac{n_\alpha^\circ}{n_s}\left(1+\frac{W(\bar{F}^*F^*)}{W(\bar{F}^*\bar{F})}\right). \tag{13.23}$$

In diesem Modell haben wir demnach einen Phasenübergang 2. Art unseres Systems vorliegen. Er tritt beim kritischen Punkt

$$W_{krit}^{SI}(c,F) = W(\bar{F}^*c)\,\frac{n_\alpha^\circ}{n_s}\left(1+\frac{W(\bar{F}^*F^*)}{W(\bar{F}^*\bar{F})}\right) \tag{13.24}$$

auf.

Da manche in (13.24) vorkommenden Übergangswahrscheinlichkeiten über die äußeren Parameter elektrisches Feld und Photonenstromstärke kontrolliert werden können, lassen sich bei Erfüllung der Bedingungen (13.22) bzw. (13.23) durch diese Abhängigkeiten eventuelle technische Anwendungen unseres Systems vorstellen. Über die "kritische" Bedingung (13.24) ergibt sich bei konstanter Einstrahlung eine kritische elektrische Feldstärke E_{krit} . In Abbildung 15 stellen wir den stationären Zustand n_L als Funktion des elektrischen Feldes dar. Als Werte der in (13.21) auftretenden Größen verwenden wir die in Anhang I und den Abschnitten 11 und 12 angegebenen.

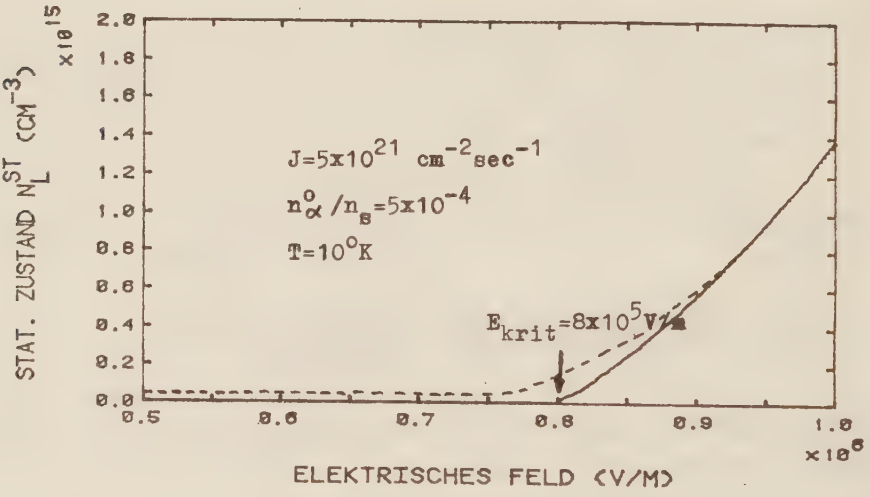


Abb. 15: Stationärer Zustand n_L des Systems (13.19)

Berücksichtigen wir zuletzt noch die thermische- und Feldionisation des F*-Zentrums ins Leitungsband, modifiziert sich der stationäre Leitungsbandzustand gemäß der gestrichelten Linie in Abbildung 15 [1]. Man sieht also, daß kein anderes qualitatives Verhalten auftritt. Man hat aber, um genau zu sein, keinen Phasenübergang 2. Art mehr vorliegen.

---

1) ----- stellt eine qualitative Kurve dar, weil sie uns noch unbekannte Werte enthält.

14. Quantenausbeute des F^* -Zentrums

Seit langem ist bekannt /49,50/, daß Quanten- und Fluoreszenzausbeuten in Halogenidkristallen mit Farbzentren von der Konzentration der F-Zentren abhängen. Entsprechend /58/ können wir die Fluoreszenzausbeute durch

$$\eta_F(t, T, n_s, \mathfrak{J}_0) := \frac{\left(\frac{\Delta \mathfrak{J}}{\Delta t}\right)_{em}}{\left|\left(\Delta \mathfrak{J}/\Delta t\right)_{abs}\right|} \tag{14.1}$$

definieren. Der Zähler in (14.1) stellt die pro Zeiteinheit emittierten Photonen dar, während der Nenner dasselbe für die im Kristall absorbierten Photonen tut. Diese letztere Größe läßt sich durch

$$\left(\frac{\Delta \mathfrak{J}}{\Delta t}\right)_{abs} \equiv \dot{\mathfrak{J}}_{abs} = -c_F n_F \mathfrak{J}_{abs} - c_{F'} n_{F'} \mathfrak{J}_{abs} \tag{14.2}$$

angeben. Die emittierten Photonen werden durch die Gleichung

$$\left(\frac{\Delta \mathfrak{J}}{\Delta t}\right)_{em} \equiv \dot{\mathfrak{J}}_{em} = W^S(F, F^*)\, n_{F^*} \left(\mathfrak{J}_{em} + 1\right) - \varkappa\, \mathfrak{J}_{em} \tag{14.3}$$

geregelt. Für unsere Zwecke vernachlässigen wir den für induzierte Emission verantwortlichen Term $W^S(F,F^*)n_{F^*}\mathfrak{J}_{em}$ und den Geometriefaktor $\varkappa \mathfrak{J}_{em}$. Insofern schreibt sich die Gleichung (14.1):

$$\eta_F(t, T, n_s, \mathfrak{J}_0) = \frac{W^S(F, F^*)\, n_{F^*}}{W^S(F^*, F)\, n_F + W^S(c, F')\, n_{F'}} \,. \tag{14.4}$$

Beschränken wir uns nun auf kurze Zeiten nach Einschalten der Lichtquelle, können wir die F'-Zentren vernachlässigen ($n_{F'} = 0$) :

$$\eta_F(t \to 0, T, n_s, \mathfrak{J}_0) = \frac{W^S(F, F^*)\, n_{F^*}}{W^S(F^*, F)\, n_F} \,. \tag{14.5}$$

Beachten wir weiter, daß aus Energieerhaltungsgründen die Anzahl der aus dem Grundzustand angeregten Elektronen gleich der ins Leitungsband ionisierten und der in den Grundzustand zurückkehrenden

Elektronen pro Zeiteinheit sein muß, so gewinnen wir aus (14.5) den endgültigen Ausdruck für die Fluoreszenzausbeute:

$$\eta_F(t=0, T, n_s, J_0) = \frac{W^S(F,F^*)\, n_{F^*}}{W^S(F,F^*)\, n_{F^*} + W^K(F,F^*)\, n_{F^*} + W(c,F^*)\, n_{F^*} + W^A(F,F^*/c,F^*)\, n_{F^*}^2} \tag{14.6}$$

$$= \frac{W^S(F,F^*)}{W^S(F,F^*) + W^K(F,F^*) + W(c,F^*) + W^A(F,F^*/c,F^*)\, n_F}$$

Wir haben mit (14.6) eine von der Zeit, der Photonenstärke und der Konzentration abhängige Ausbeute mittels der Augerbeteiligung gewonnen. Bei der expliziten Berechnung dieser Ausbeute in Abhängigkeit der äußeren Parameter ist man sehr an das zu behandelnde Modell gebunden. Will man aus (14.6) die Zeit eliminieren, so wäre der stationäre Wert der F^*-Zentren-Konzentration bei den jeweiligen Parametern einzusetzen. Da deren Berechnung für den allgemeinen Fall äußerst umfangreich und kompliziert ist, wollen wir uns auf die obige Angabe der Fluoreszenzausbeute für das F^*-Zentrum beschränken. Wir müssen deren Auswertung anderen Untersuchungen überlassen, da selbst die Verwendung der im nächsten Kapitel verwendeten Methode auf keine schnellen Resultate führt. Die Annahme dieser Augerübergänge [1] verändert nämlich nach Testuntersuchungen die Struktur der ohne diese gewonnenen Lösungen drastisch.

---

[1] mittels der in Abschnitt 8 und 9 berechneten Werte

15. Zeitliche Vorgänge im Reaktionssystem

In diesem Abschnitt untersuchen wir Ein- und Ausschaltvorgänge von einer äußeren Lichtquelle an unserem durch (13.1) gegebenen Reaktionssystem von F- und F'-Zentren. Wir wollen dies nicht in voller Allgemeinheit vornehmen, sondern uns auf speziell vorgegebene Situationen unseres Modells beschränken.

Wie allgemein bekannt ist, läßt sich die Lösung eines nichtlinearen Differentialgleichungssystems nicht leicht oder oft überhaupt nicht angeben. Eine Methode zur Auffindung einer solchen Lösung ist durch die Lie-Reihen-Methode gegeben /59/. So konnte das Modell eines Riesenimpulslasers mit dieser Methode erfolgreich behandelt werden /60/. Untersuchungen unseres Systems mit dieser Methode sind aber erheblich aufwendiger und schwieriger vorzunehmen, da es strukturell komplizierter ist. Die Aufsummation der Reihen läßt sich in unserem Fall nicht analytisch durchführen und müßte deshalb maschinell vorgenommen werden. Hinzu kommt, daß der Konvergenzradius dieses Verfahrens äußerst klein ist und deshalb viele analytische Fortsetzungen notwendig macht.

Aufgrund dieser Schwierigkeiten wählen wir den direkten numerischen Weg zur Integration unseres Systems. Dazu gibt es verschiedene Simulationssprachen. Wir verwenden für unser System zwei sehr praktikable und anwendungsfreundliche Programmiersprachen Dare P /61/ und Gasp IV /62/. Die Art der Anwendung und deren Aufbau und Integrationsmethoden sind ausführlich in /61,62/ beschrieben.

Bevor wir nun unser System simulieren, müssen einige Bemerkungen vorausgeschickt werden.

Die üblichen experimentellen Anfangssituationen eines Halogenidkristalls mit Farbzentren zeigen, daß allein F-Zentren-Grundzustände vorhanden sind. Zu diesen Zuständen kommen noch die bereits in Abschnitt 13 erwähnten "eingefrorenen" α-Zentren (Schottky-Defekte) /48/ hinzu. Somit geben wir uns folgende Anfangsbedingungen vor:

$$n_F(0) = n_S\,; \quad n_{F^+}(0) = n_{F'}(0) = n_L(0) = 0$$
$$n_\alpha(0) = n_\alpha^0 = 5 \cdot 10^{12}\ cm^{-3}\ ^{1)} \qquad (15.1)$$

---

1) Siehe /48/

Als zusätzliche Erweiterung des Systems (13.1) führen wir den strahlenden Übergang des F'-Zentrums ins Leitungsband ein. Die Rechtfertigung dieser Mitnahme basiert auf der Überlappung der F- und F'-Bande. Durch die äußere Einstrahlung in die F-Absorptionsbande werden insofern auch F'-Zentren strahlend angeregt. Für deren Absorptionsquerschnitt verwenden wir die in /49/ angegebene Beziehung

$$C_{F'}(\omega_F^{max}) = \frac{1}{3} C_F(\omega_F^{max}). \qquad (15.$$

Betrachten wir nun den Fall geringer Dotierung ($n_s < 10^{16}$ cm^{-3}) und ausgeschalteten äußeren elektrischen Feldes, verhalten sich die F-Zentren nach Einschaltung einer Lichtquelle der Stärke $\mathcal{J}_o = 5 \cdot 10^{21}$ cm^{-2} sec^{-1} und einer Brenndauer von 2 μsec für die verschiedenen Temperaturen entsprechend Abbildung 16.

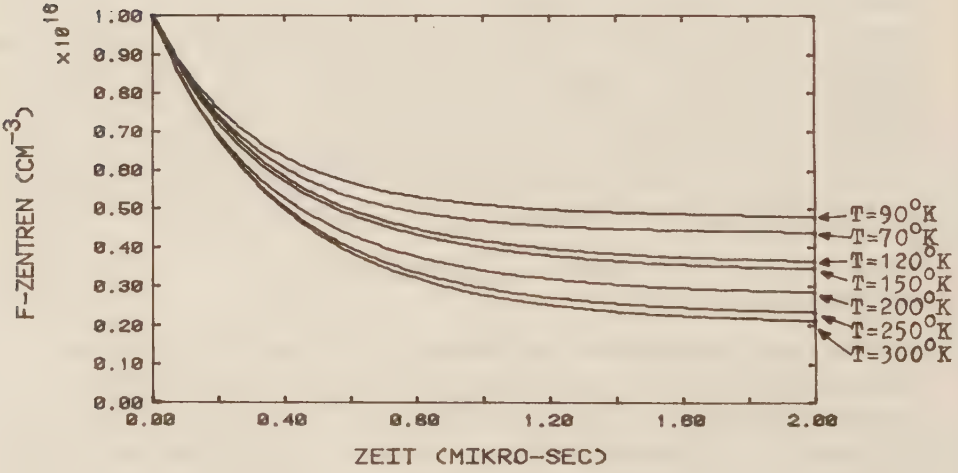


Abb. 16: Zeitliches Verhalten der F-Zentren bei Einstrahlung

Wie sich aus den Temperaturangaben dieser Abbildung entnehmen läßt, dreht sich das Verhalten des quasistationären Zustandes oberhalb 2 μsec bei der Temperatur $T = 100^{\circ}$ K von einem steigenden zu einem fallenden Verhalten um. Dieses läßt sich durch die in der Abbildung 17 dargestellten Verläufe der F^*-Zentren bzw. Leitungsbandkonzentrationen erklären. Bei Temperaturen oberhalb 100° K tritt die thermische Ionisation der F^*-Zentren verstärkt auf. Die Leitungsbandkonzentration verändert ab diesen Temperaturen ihr Verhalten. Es bildet sich ein Maximum kurz nach Beginn der Einschaltung aus, bevor ein quasistationärer Wert erreicht wird. Entsprechend treten bei diesen Temperaturen vermehrt F'-Zentren vermöge des Einfangs von Leitungsbandelektronen durch F-Zentren auf, was zu dem oben beschriebenen Verhalten der F-Zentren führt.

Wird nach 2 μsec die Strahlungsquelle abgeschaltet, stellt sich der in den Abbildungen 18, 19 dargestellte zeitliche Verlauf des Abklingvorganges ein. Auch hier markiert die Temperatur von $T = 100^{\circ}$ K eine Verhaltensänderung des Systems. Wie man aus dem Verhalten der F^*-Zentren sieht, liegt unterhalb 100° K ein rein exponentielles Verhalten vor. Oberhalb 100° K können zwei weitere Temperaturbereiche festgestellt werden. Im Bereich $180^{\circ} - 300^{\circ}$ K treten zwei klar zu trennende Abklingbereiche zutage, in denen jeweils ein Prozeß dominierend ist, während im Übergangsbereich von $100^{\circ} - 180^{\circ}$ K beide Zerfallsprozesse miteinander konkurrieren. Das F'-Zentren-Verhalten weist entsprechende Verhaltensweisen auf. So steigt unterhalb $T = 120^{\circ}$ K deren Konzentration erst einmal geringfügig an, bevor sie in einen quasistationären Wert übergeht. Oberhalb 120° K findet ein Zerfall über die thermische Ionisation statt. Das Verhalten der Leitungsbandkonzentration paßt sich diesen beiden Verhaltensweisen an. Aus Platzgründen geben wir die entsprechenden Darstellungen nicht an.

Als weiteren Fall untersuchen wir die Situation geringer Temperatur ($T = 10^{\circ}$ K) und äußeren elektrischen Feldes. Auch hier benutzen wir die Laserlichtquelle von $\mathfrak{J}_0 = 5 \cdot 10^{21}$ cm^{-2} sec^{-1}. Verwenden wir für diesen Tatbestand das durch (13.19) beschriebene und in /46/ auf Stabilität und stationäres Nichtgleichgewicht untersuchte Reaktionssystem, müßte das in Abschnitt 13 beschriebene Verhalten beim Einschwingvorgang festzustellen sein.

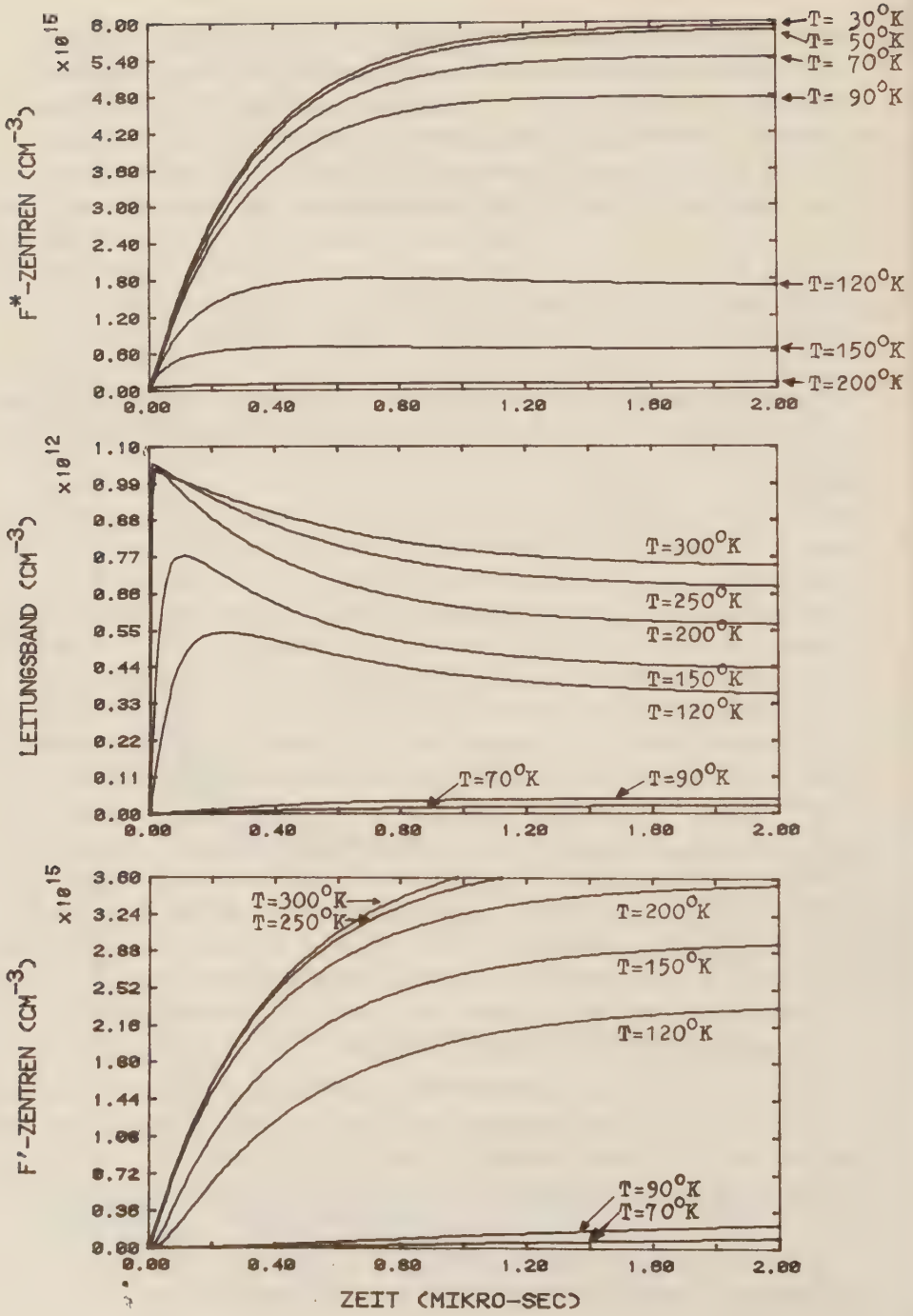


Abb. 17: Zeitliches Verhalten der F*-F'-Zentren und Leitungsbandelektronen bei Einstrahlung

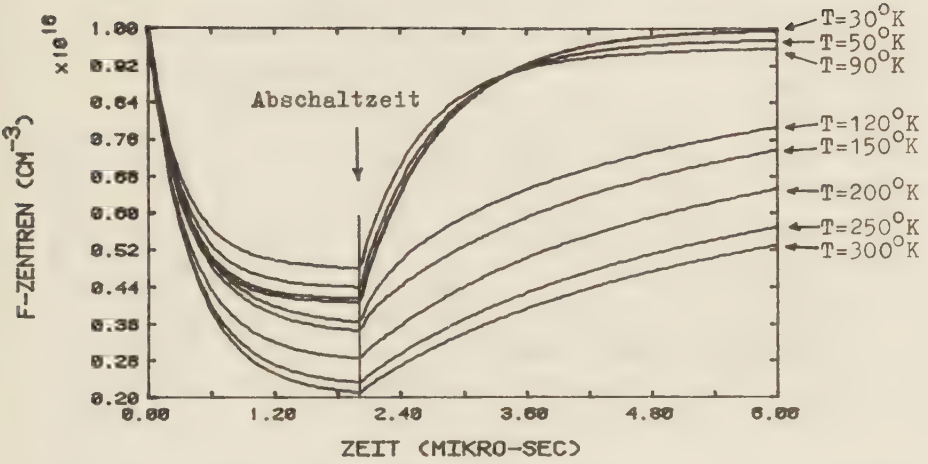


Abb. 18: Verhalten der F-Zentren beim Ein- und Ausschaltvorgang

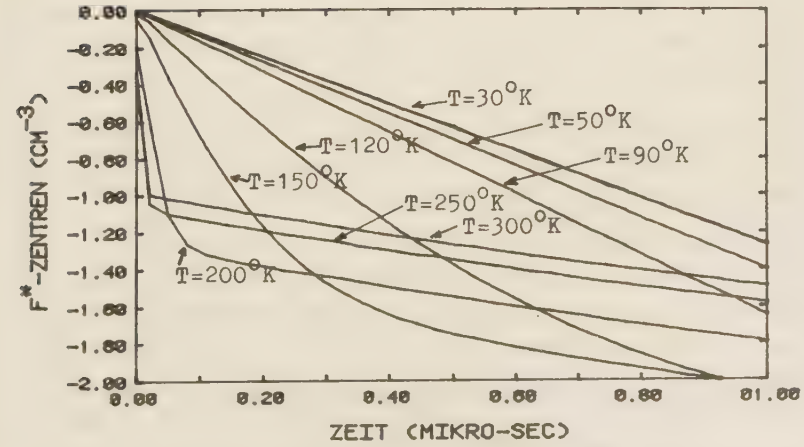


Abb. 19: Normierte log. Darstellung der F* -Zentren-Konzentration des Abklingvorgangs

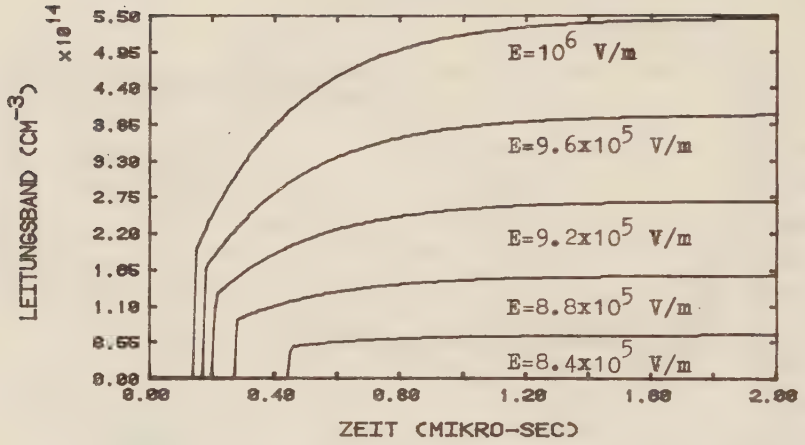


Abb. 20: Einschwingvorgang der Leitungsbandelektronen beim elektrischen Feld ohne F'-Zentren-Beteiligung

In der Tat steigt oberhalb der Feldstärke 8×10^5 V/m die Elektronenkonzentration des Leitungsbandes von 0 auf die in Abbildung 20 angegebenen Werte an. Man erkennt aus dieser Darstellung ebenfalls, daß diese Konzentration nach jeweiligen Verzögerungszeiten ruckartig auf diese Werte ansteigt.

Weitere Untersuchungen dieses System zeigen, daß das Verhalten bei Temperaturen oberhalb $T = 50^{\circ}$ K verschwindet und durch die entsprechenden thermischen Ionisationsprozesse ersetzt wird.

Wir müssen an dieser Stelle aber die Bermerkung anbringen, daß das durch (13.19) beschriebene System nicht der Realität entspricht. Da durch die hohe Elektronenkonzentration des Leitungsbandes dem Einfangprozeß dieser Elektronen durch F-Zentren enorme Bedeutung zukommt, muß dieser im Reaktionssystem mitberücksichtigt werden. Tun wir dies, erhalten wir das in den Abbildungen 21 und 22 dargestellte Verhalten der Leitungsbandelektronen bzw. F'-Zentren. Der quasistationäre Wert der Konzentration beim Feld 10^6 V/m reduziert sich auf einen "Pik" bei $t = 0.827\ \mu$sec . Danach

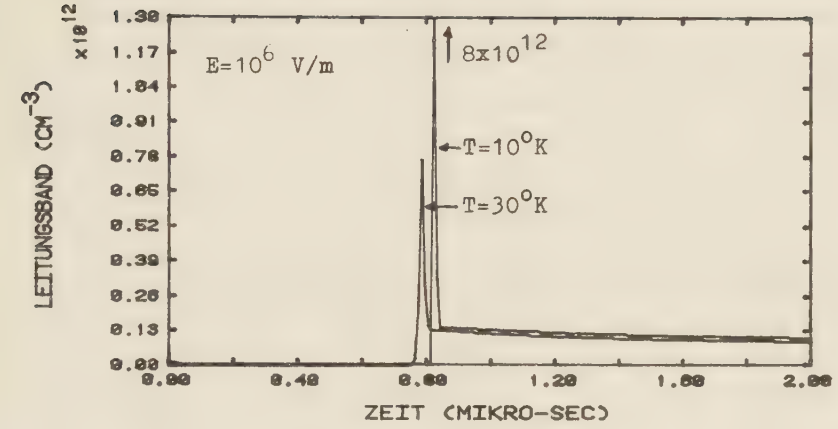


Abb. 21: Einschwingvorgang der Leitungsbandelektronen beim elektrischen Feld mit F'-Zentren-Beteiligung

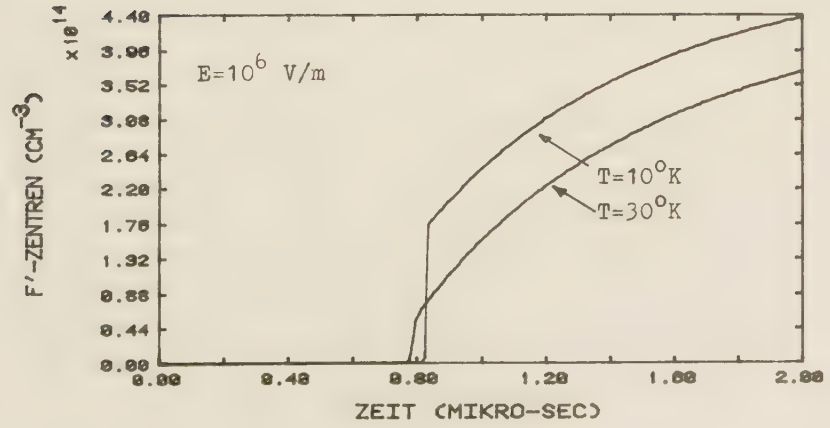


Abb. 22: F'-Produktion bei äußerem elektrischem Feld

nimmt die Elektronenkonzentration "langsam" ab, ist jedoch noch viel größer als bei entsprechender Situation ohne Feld. Es ist nach Abbildung 22 klar, daß dieser "Pik" durch die F'-Zentren-Produktion verursacht wird. In der Abbildung 23 stellen wir in einer Vergrößerung dieses eben beschriebene "zeitliche Resonanzverhalten" nochmals dar.

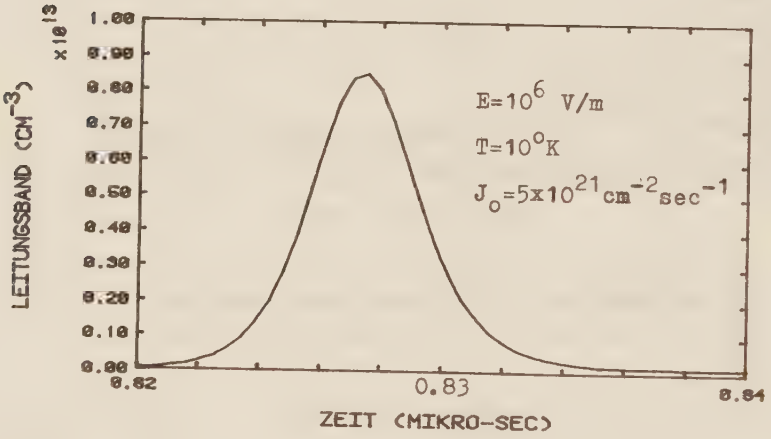


Abb. 23: "Resonanzverhalten" im Leitungsband bei äußerem elektrischen Feld

Als Abschluß dieser Betrachtung bemerken wir noch, daß bei äußerem elektrischen Feld die Feldionisation (Tunnel-Effekt) mitberücksichtigt werden muß. Dies wurde in den bisherigen Untersuchungen aus Unkenntnis der numerischen Übergangswerte unterlassen. Falls diese Werte genauer zu untersuchende Größenordnungen annehmen, verschwindet das oben beschriebene Verhalten. Auf der anderen Seite ließe sich aber durch ein äußeres Magnetfeld eine äquivalente [1] Situation schaffen, so daß bei entsprechenden Magnetfeldstärken ähnliche Effekte in Erscheinung treten müßten.

---

1) Wir verweisen dazu auf die in Abschnitt 10 angegebenen Ausführungen.

Anhang A: Thermisches Gleichgewicht im Leitungsband

Wir referieren hier kurz die Ergebnisse von E. Schöll /27/ über die Quasiimpulsabhängigkeit k der Besetzungswahrscheinlichkeiten (6.19).

Dort werden die Elektronen, die im F-Zentrum Grundzustand, im angeregten F^* -Zustand sowie jene, die im F'-Zentrum und im Leitungsband vorhanden sind, jeweils zu Kollektiven zusammengefaßt, innerhalb deren sich ein thermisches Gleichgewicht ausbildet.

Die Rechtfertigung dieser physikalischen Annahme ist für die Störzentrenzustände unproblematisch; für das Leitungsband besteht sie darin, daß Übergänge innerhalb des Bandes viel schneller verlaufen als Übergänge zwischen Leitungsband und Störzentren (Relaxationszeiten innerhalb des Bandes sind von der Größenordnung 10^{-12} sec , während die mittlere Verweildauer von Elektronen im Leitungsband von der Größe $10^{-3} - 10^{-11}$ sec ist).

Mathematisch läßt sich deshalb der Hilbertraum aller Störelektronen $\mathcal{H}_E$ zerlegen in

$$\mathcal{H}_E = \sum_{n=0}^{S} \oplus \; \mathcal{H}_F^{S-n} \otimes \mathcal{H}_C^{n} \tag{A.1}$$

wobei $\mathcal{H}_C^n$ der n-Teilchen-Hilbertraum der Leitungsbandelektronen und $\mathcal{H}_F^{S-n}$ der (s-n)-Teilchen-Raum der F-, F^* - und F'-Elektronen ist.

Die Spurbildung in $\mathcal{H}_E$ zerfällt damit ebenfalls in

$$Sp_E = \sum_{n=0}^{S} Sp_F^{S-n} \; Sp_C^{n} \tag{A.2}$$

mit den partiellen Spuren

$$Sp_F^{S-n} \equiv \sum_{k_1 \dots k_m} \; \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta_1 \dots \beta_n \gamma_1 \dots \gamma_m \delta_1 \dots \delta_m} \delta_{s-n,\, k+l+2m}$$

$$Sp_C^{n} \equiv \sum_{k_1 \dots k_n} \; . \tag{A.3}$$

Der statistische Operator $\hat{\varrho}_E$ läßt sich durch

$$\hat{\varrho}_E = \sum_{n=1}^{S} f_n \hat{\varrho}^n \tag{A.4}$$

ausdrücken, wobei

- $\hat{\varrho}^n$ der statistische Operator im Raum $\mathcal{H}_F^{s-n} \otimes \mathcal{H}_C^n$ und
- f_n die Wahrscheinlichkeit dafür ist, daß der Zustand in diesem direkten Summanden des Gesamthilbertraumes (A.1) liegt.

Bei Vernachlässigung der Korrelation zwischen Leitungsband und Störelektronen spaltet $\hat{\varrho}^n$ weiter auf:

$$\hat{\varrho}^n = \hat{\varrho}_F^{s-n} \otimes \hat{\varrho}_C^n \tag{A.5}$$

mit

$$\hat{\varrho}_F^{s-n} := Sp_C^{s-n} \hat{\varrho}^n \qquad \text{(statistischer Operator der Störelektronen)}$$

$$\hat{\varrho}_C^n := Sp_F^n \hat{\varrho}^n \qquad \text{(statistischer Operator der n Leitungsbandelektronen)} . \tag{A.6}$$

Und deshalb faktorisieren die Besetzungswahrscheinlichkeiten ebenfalls:

$$\begin{aligned} p_{k\ell m n}^{k_1 \dots k_n} &= \langle \lambda_1 \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_\ell \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{s-n} \, k_1 \dots k_n \,|\, \hat{\varrho}_E \,|\, \lambda_1 \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_\ell \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{s-n} \, k_1 \dots k_n \rangle \\ &= \langle \lambda_1 \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_\ell \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{s-n} \,|\, f_n \hat{\varrho}_F^{s-n} \,|\, \lambda_1 \dots \lambda_k \mu_1 \dots \mu_\ell \nu_1 \dots \nu_m \varrho_1 \dots \varrho_{s-n} \rangle \langle k_1 \dots k_n \,|\, \hat{\varrho}_C^n \,|\, k_1 \dots k_n \rangle \\ &=: p_{k\ell m n} \, f_{k_1 \dots k_n} . \end{aligned} \tag{A.7}$$

Die Normierung der thermischen Gleichverteilungsfunktion $f_{k_1 \dots k_n}$ lautet der Selbstkonsistenz wegen für jedes n :

$$Sp_C^n \hat{\varrho}_C^n = \sum_{k_1 \dots k_n}^{k} f_{k_1 \dots k_n} = 1 . \tag{A.8}$$

Bilden wir nun von (A.7) die partielle Spur Sp_c^n

$$\sum_{k_1 \ldots k_n}{}^{\prime\prime} p^{k_1 \ldots k_n}_{klmnm+n} = p_{klmn} \sum_{k_1 \ldots k_n}{}^{\prime\prime} f_{k_1 \ldots k_n} = p_{klmn} \tag{A.9}$$

und multiplizieren diesen Ausdruck mit $\frac{s!}{k!\, l!\, m!\, (m+n)!}$

$$\tilde{p}_{klmn} := \frac{s!}{k!\, l!\, m!\, (m+n)!}\, p_{klmn} = \sum_{k_1 \ldots k_n}{}^{\prime\prime} \frac{s!}{k!\, l!\, m!\, (m+n)!}\, p^{k_1 \ldots k_n}_{klmm+n} \tag{A.10}$$

$$= \sum_{k_1 \ldots k_n}{}^{\prime\prime} \tilde{p}^{k_1 \ldots k_n}_{klmm+n} ,$$

so erhalten wir die in Abschnitt 6 definierten Größen.

Bei der weiteren Vernachlässigung der Wechselwirkung der Leitungsbandelektronen untereinander, was für die Besetzungswahrscheinlichkeit eines Elektrons die Unabhängigkeit von der Besetzung der übrigen Leitungsbandzustände bedeutet, kann $f_{k_1 \ldots k_n}$ als ein Produkt geschrieben werden:

$$f_{k_1 \ldots k_n} = f_{k_1 \ldots k_{n-1}}\, f_{k_n} . \tag{A.11}$$

Für Elektronen als Fermionen schreibt sich dann eine solche Gleichgewichtsverteilung

$$f_k = \left(e^{\beta(E_k - E_F)} + 1 \right)^{-1} , \tag{A.12}$$

mit dem Quasifermi-Niveau E_F und der Energie E_k .

Wird weiter als Modell des Leitungsbandes ein isotropes parabolisches Band mit der effektiven Masse m^* und dem Energienullpunkt in der Leitungsbandunterkante angenommen, erhalten wir aus

$$n_L = Sp_E \left[\hat{S}_E \hat{n} \right] \tag{A.13}$$

eine Bedingung zur Bestimmung des Quasifermi-Niveaus E_F der Verteilung (A.12), das verhältnismäßig einfach mit der Integralnäherung berechenbar ist:

$$
\begin{aligned}
n_L &= Sp_E\left[\hat{\rho}_E \hat{n}\right] \\
&= \sum_{klmn} \tilde{\rho}_{klmn}\, \delta_{s,k+l+2m+n} \sum_{k_1 \cdots k_{n-1}}^{k} \sum_{k}^{\neq} f_{k_1 \cdots k_{n-1}} f_k \\
&\approx \sum_{k_1 \cdots k_{n-1}}^{k} f_{k_1 \cdots k_{n-1}} \sum_{k} f_k \\
&\approx \sum_{k} f_k \approx \int_0^\infty \mathcal{D}(E)\, f(E,\beta)\, dE \\
&= n_0 \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2}\left(\frac{E_F}{kT}\right)
\end{aligned}
\tag{A.14}
$$

mit dem Fermi-Integral

$$
F_{1/2}(y) := \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{1 + e^{x-y}}\, dx, \tag{A.15}
$$

der Entartungskonzentration

$$
n_0 := \frac{V}{4}\left(\frac{2m^* kT}{\pi \hbar^2}\right)^{3/2} \tag{A.16}
$$

und der Zustandsdichte für dieses Band

$$
\mathcal{D}(E) := \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2} . \tag{A.17}
$$

Wir in /27/ gezeigt wird, kann das Fermi-Integral für

$$
y \equiv \frac{E_F}{kT} < 1.5
$$

geschlossen durch

$$F_{\frac{1}{2}}(y) \cong \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{4}{4e^{-y}+1} \tag{A.18}$$

dargestellt werden.

Diese Bedingung lautet, auf experimentelle Größen bezogen:

$$n_L \leq n_0 \qquad \text{Nicht oder nur schwach entarteter Halbleiter.} \tag{A.19}$$

Sie ist für realistische experimentelle Situationen immer erfüllt, so daß wir als Fermienergie aus (A.14) und (A.18)

$$E_F(n_L) = -kT \ln\left(\frac{n_0}{n_L} - \frac{1}{4}\right) \tag{A.20}$$

erhalten. Die Fermiverteilung (A.12) wird in dieser Näherung

$$f_k(\beta, n_L) = \left(\left(\frac{n_0}{n_L} - \frac{1}{4}\right)\exp\left\{\beta\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}\right\} + 1\right)^{-1}. \tag{A.21}$$

Im Spezialfall der vollständigen Nicht-Entartung

$$n_L \ll n_0 \tag{A.22}$$

kann die obige Verteilung (A.21) durch die klassische Boltzmann-Verteilung angenähert werden:

$$f_k(\beta, n_L) \cong \frac{n_L}{n_0} \exp\left\{-\beta\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}\right\}. \tag{A.23}$$

Anhang B: Elektronisches Matrixelement für $W^A(F,F^*/c,F^*)$

Das elektronische Matrixelement dieses Übergangs ist nach (8.2) gegeben durch

$$M_e = \langle \psi_F(u)\,\psi_c(u'-d,k) \,|\, e^2 C(u,u') \,|\, \psi_{F^*}(u)\,\psi_{F^*}(u',d) \rangle - \\ - \langle \psi_F(u)\,\psi_c(u'-d,k) \,|\, e^2 C(u,u') \,|\, \psi_{F^*}(u')\,\psi_{F^*}(u,d) \rangle \qquad (B.1)$$

$$=: M_c^e + M_{ex}^e \,.$$

Mit den Spinanteilen der Wellenfunktionen gilt für das Quadrat dieser Größe:

$$M_e^2 = |M_c^e|^2 + |M_{ex}^e|^2 + |M_c^e - M_{ex}^e|^2 \,. \qquad (B.2)$$

Da die Störzentrenabstände 50 Å - 500 Å voneinander entfernt sind, vernachlässigen wir die Austauschwechselwirkung in (3.2), die in der Größe M_{ex}^e zusammengefaßt ist. Die Coulombwechselwirkung in M_c^e kommt allein zum Tragen. Oft wird dieser Tatbestand /18/ durch

$$I_{F^*}(k,R_u) := M_c^2 = \varkappa_{F^*} |M_c^e|^2 \qquad (B.3)$$

ausgedrückt und der Parameter $\varkappa_{F^*}$ ($2 \leq \varkappa_{F^*} \leq 4$) entsprechend gewählt.

Berechnen wir nun M_c^e mit den in (8.3) - (8.6) angegebenen Wellenfunktionen, gewinnen wir insgesamt 16 Teilmatrixelemente. Diese lassen sich aus Symmetriegründen auf 7 Elemente reduzieren. Von diesen 7 Matrixelementen verschwinden wiederum 4 aus Symmetriegründen der Ladungsverteilung, so daß insgesamt 3 Matrixelemente ausintegriert werden müssen:

$$M_e = (1+a^2)^{-1} \Big[\langle \psi_F(u)\,\psi_c(u'-d,k) \,|\, e^2 C(u,u') \,|\, \psi_{2s}(u)\,\psi_{1s}(u',d) + \frac{a}{\sqrt{3}} \langle \psi_F(u)\,\psi_c(u'-d,k) \,| \times$$

$$\times e^2 C(u,u') \,|\, \psi_{2p_z}(u)\,\psi_{2s}(u',d) \rangle + \frac{a}{\sqrt{3}} \langle \psi_F(u)\,\psi_c(u'-d,k) \,|\, e^2 C(u,u') \,|\, \psi_{2p_z}(u)\,\psi_{1p_z}(u',d) \rangle \qquad (B.4)$$

$$=: M_1 + M_2 + M_3 \,.$$

Wie bereits am Anfang von Abschnitt 8 dargelegt ist, verwenden wir zur weiteren Berechnung Wellenfunktionen, die im Abstand R_n vom Nullpunkt der einen Wellenfunktion auf der z-Achse lokalisiert sind. Da wir die explizite Struktur des Leitungsbands und damit auch der exakten Blockfunktion Ψ_c des ionisierten Kristalls KI nicht kennen, approximieren wir $U_k(\vec{r})$ durch eine Konstante. Detailliertere Rechnungen konnten auch Polaronenfunktionen als Leitungsbandfunktionen verwenden /37,38/.

Entwickeln wir nun das Coulombpotential und die ebenen Wellen nach Kugelflächenfunktionen, so erhalten wir in einem ersten Rechenschritt:

$$M_1 = \mathrm{vor}_1\, e^{-i\vec{k}\vec{R}_n} \sum_{l,m} i^l Y_{lm}^*(\Omega_k) \iiint r^2 j_l(kr)\left(1-\gamma\sqrt{r^2+R_n^2-2rR_n\cos\vartheta}\right) e^{-\beta\sqrt{r^2+R_n^2-2rR_n\cos\vartheta}} \cdot \tag{B.5}$$

$$\cdot Y_{00}^*(\Omega)\, Y_{lm}(\Omega)\, f_2(r,\alpha,\gamma)\, dr\, d\Omega$$

mit

$$\mathrm{vor}_1 := \frac{16\pi}{\sqrt{4\pi}}\, e^2 \alpha^{3/2} \gamma^3 (1+a^2)^{-1/2}$$

$$f_2(r,\alpha,\beta) := \sqrt{4\pi}\left[\frac{e^{-(\alpha+\beta)r}}{\alpha+\beta}\left\{\left(\frac{6\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^2}-\frac{\alpha-\beta}{\alpha+\beta}\right)r+\frac{\alpha\beta}{\alpha+\beta}r^2+\left(\frac{18\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^3}-\frac{4(\alpha-\beta)}{(\alpha+\beta)^2}-\right.\right.\right. \tag{B.6}$$

$$\left.\left.\left.-\frac{1}{\alpha+\beta}\right)+\left(\frac{24\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^4}-\frac{6(\alpha-\beta)}{(\alpha+\beta)^3}-\frac{2}{(\alpha+\beta)^2}\right)\frac{1}{r}\right\}+\left(\frac{2}{(\alpha+\beta)^3}+\frac{6(\alpha-\beta)}{(\alpha+\beta)^4}-\frac{24\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^5}\right)\frac{1}{r}\right]$$

Mit der Darstellung

$$Y_{lm}(\Omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\, P_l^m(\vartheta)e^{im\varphi} =: \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, c_{lm}\, P_l^m(\vartheta)\, e^{im\varphi} \tag{B.7}$$

und den weiteren Definitionen

$$p_l^2(r,\xi,R_n) := \xi\int_{-1}^{1} P_l(u)\, e^{-\xi\sqrt{r^2+R_n^2-2rR_nu}}\sqrt{r^2+R_n^2-2rR_nu}\, du \tag{B.8}$$

$$p_l^1(r,\xi,R_n) := \int_{-1}^{1} P_l(u)\, e^{-\xi\sqrt{r^2+R_n^2-2rR_nu}}\, du \tag{B.9}$$

läßt sich (B.5) weiter auswerten:

$$M_1 = V_1^{FF}\, e^{-i\vec{k}\vec{R}_n} \sum_{l=0}^{\infty} i^l\, Y_{l0}^*(\Omega_k) \int_0^{\infty} r^2 j_l(kr) f_2(r,\alpha,\beta)\left\{P_l'(r,\gamma,R_n) - P_l^2(r,\gamma,R_n)\right\} C_{l0}\, dr \qquad \text{(B.10)}$$

$$V_1^{FF} := 16\pi\sqrt{2/7}\; e^2 \alpha^{3/2} \gamma^3 (1+\alpha^2)^{-1/2} \qquad \text{(B.11)}$$

Da die Integrale (B.8) und (B.9) nicht geschlossen angebbar sind, läßt sich (B.10) nicht ausintegrieren.

Durch entsprechende Rechnungen für M_2 und M_3, den Definitionen

$$f_1(r,\alpha,\beta) := 24\frac{6\alpha+\beta}{(\alpha+\beta)^5}\frac{1}{r^2} - \frac{e^{-(\alpha+\beta)r}}{(\alpha+\beta)^5}\left[3\alpha r^2 + 3\frac{7\alpha+\beta}{\alpha+\beta}r + 12\frac{6\alpha+\beta}{(\alpha+\beta)^2} + 24\frac{6\alpha+\beta}{(\alpha+\beta)^3}\frac{1}{r} + 24\frac{6\alpha+\beta}{(\alpha+\beta)^4}\frac{1}{r^2}\right] \qquad \text{(B.12)}$$

$$V_2^{FF} := \frac{32\pi}{9}\sqrt{6/7}\; e^2 \alpha^{3/2} \beta^{5/2} \gamma^{3/2} a (1+a^2)^{-1/2} \qquad \text{(B.13)}$$

$$V_3^{FF} := \frac{16\pi}{9}\sqrt{2/7}\; e^2 \alpha^{3/2} \beta^5 a^2 (1+a^2)^{-1/2} \qquad \text{(B.14)}$$

und der Beziehung

$$\cos\vartheta\, Y_{lm}(\Omega) = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}\frac{l-m+1}{2l+3}}\, Y_{l+1,m}(\Omega) + \sqrt{\frac{l-m}{2l-1}\frac{l+m}{2l+1}}\, Y_{l-1,m}(\Omega)$$

$$=: a_{lm}\, Y_{l+1,m}(\Omega) + b_{lm}\, Y_{l-1,m}(\Omega) \qquad \text{(B.14)}$$

schreiben sich

$$M_2 = V_2^{FF} e^{-i\vec{k}\vec{R}_n} \sum_{l=0}^{\infty} i^l\, Y_{l0}^*(\Omega_k) \int_0^{\infty} r^2 j_l(kr) f_1(r,\alpha,\beta)\left[C_{l+1,0}\, a_{l0}\left\{P_{l+1}'(r,\gamma,R_n) - P_{l+1}^2(r,\gamma,R_n)\right\} + C_{l-1,0}\, b_{l0}\left\{P_{l-1}'(r,\gamma,R_n) - P_{l-2}^2(r,\gamma,R_n)\right\}\right] dr \qquad \text{(B.15)}$$

$$H_3 = V_3^{\vec{r}^*} e^{-i\vec{k}\vec{R}_n} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell Y_{\ell 0}^*(\Omega_k) \int_0^\infty r^2 j_\ell(kr) f_1(r,\alpha,\beta) \Big[r \Big\{ a_{\ell 0} a_{\ell+1,0} c_{\ell+2,0} P_{\ell+2}^1(r,\beta,R_n) +$$

$$+ (a_{\ell 0} b_{\ell+1,0} + b_{\ell 0} a_{\ell-1,0}) c_{\ell 0} P_\ell^1(r,\beta,R_n) + b_{\ell 0} b_{\ell-1,0} c_{\ell-2,0} P_{\ell-2}^1(r,\beta,R_n) \Big\} - \qquad \text{(B.16)}$$

$$- R_n \Big\{ a_{\ell 0} c_{\ell+1,0} P_{\ell+1}^1(r,\beta,R_n) + b_{\ell 0} c_{\ell-1,0} P_{\ell-1}^1(r,\beta,R_n) \Big\} \Big] .$$

Mit (B.5), (B.15) und (B.16) errechnet sich (B.3) zu:

$$I_{\vec{r}^*}(k,R_n) = \alpha_{\vec{r}^*} \sum_{\ell=0}^{\infty} \Big\{ \int_0^\infty r^2 j_\ell(kr) \Big[a_{\ell 0} c_{\ell+1,0} V_2^{\vec{r}^*} f_1(r) \big(P_{\ell+1}^1(r,\gamma,R_n) - P_{\ell+1}^2(r,\gamma,R_n) \big) + \qquad \text{(B.17)}$$

$$+ c_{\ell+1,0} V_1^{\vec{r}^*} f_2(r) \big(P_\ell^1(r,\gamma,R_n) - P_\ell^2(r,\gamma,R_n) \big) + c_{\ell-1,0} b_{\ell 0} V_2^{\vec{r}^*} f_1(r) \big(P_{\ell-1}^1(r,\gamma,R_n) - P_{\ell-1}^2(r,\gamma,R_n) \big)$$

$$+ V_3^{\vec{r}^*} f_1(r) \Big\{ c_{\ell-2,0} b_{\ell 0} b_{\ell-1,0} r P_{\ell-2}^1(r,\beta,R_n) + (a_{\ell 0} b_{\ell+1,0} + b_{\ell 0} a_{\ell-1,0}) r P_\ell^1(r,\beta,R_n)$$

$$+ c_{\ell+2,0} a_{\ell 0} a_{\ell+1,0} r P_{\ell+2}^1(r,\beta,R_n) - R_n \big(a_{\ell 0} c_{\ell+1,0} P_{\ell+1}^1(r,\beta,R_n) +$$

$$+ b_{\ell 0} c_{\ell-1,0} P_{\ell-1}^1(r,\beta,R_n) \big) \Big\} \Big] \Big\}^2 .$$

Anhang C: Numerische Verfahren und FORTRAN-Programme für den Auger-Übergang ($F^* \longrightarrow c / F^* \longrightarrow F$) bzw. ($F' \longrightarrow c / F^* \longrightarrow F$)

In einem ersten Schritt müssen wir die Funktionen p_ℓ^1 und p_ℓ^2 (B.8) bzw. (B.9) berechnen.

Definieren wir:

$$x := \xi \sqrt{r^2 + R_n^2 - 2 r R_n u} = \sqrt{A + B u} \qquad \text{(C.1)}$$

mit

$$A := \gamma^2 (r^2 + R_n^2)$$

$$B := -2\gamma^2 r R_n .$$

Wir setzen (C.1) in (B.8) bzw. (B.9) ein und machen von der Darstellung der Legendre-Polynome

$$P_\ell(u) = \sum_{\substack{n=0,2,\dots \\ n=1,3,\dots}} (-1)^{\frac{1}{2}(\ell-n)} \frac{(\ell+n)!}{2^\ell \left(\frac{\ell+n}{2}\right)! \left(\frac{\ell-n}{2}\right)! \, n!} u^n \qquad \text{(C.2)}$$

$$=: \sum_{\substack{n=0,2,\dots \\ n=1,3,\dots}} d_n^\ell \, u^n$$

und der binomischen Formel

$$(a+b)^n = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{n}{k} a^k b^{n-k} \qquad \text{(C.3)}$$

Gebrauch, so schreiben sich die Polynome p_ℓ^1 bzw. p_ℓ^2:

$$p_\ell^i(r, \xi, R_n) = 2 \sum_{\{n\}} \sum_{k=0}^{n} (-1)^k A^k B^{-n-1} d_n^\ell \binom{n}{k} \int_{\gamma|r+R_0|}^{\gamma|r-R_0|} x^{2(n-k)+i} e^{-x} \, dx \; ; \; i = 1,2 . \qquad \text{(C.4)}$$

Das Integral in (C.4) ist lösbar mit der allgemeinen Formel

$$\int e^{ax} P(x) \, dx = e^{ax} \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \frac{P^{(k)}(x)}{a^k} , \qquad \text{(C.5)}$$

wobei $P(x)$: das Polynom n-ten Grades und

$P^{(k)}(x)$: die k-te Ableitung von $P(x)$ bezeichnet.

Somit wird (C.4):

$$p_e^i(r,\xi,R_n) = -e^{-X} \sum_{\{n\}} \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \binom{n}{k} \frac{\left[\gamma^2(r^2+R_n^2)\right]^k}{\left[-2\gamma^2 r R_n\right]^{n+1}} \alpha_n^\ell \cdot$$

$$\cdot \sum_{m=0}^{2(n-k)+i} \frac{(2(n-k)+i)!}{(2(n-k)+i-m)!} X^{2(n-k)+i-m} \Bigg|_{\gamma|r-R_0|}^{\gamma|r+R_0|} \qquad i=1,2 . \qquad \text{(C.6)}$$

Als letzte Aufgabe bleibt noch das Einsetzen der oberen und unteren Grenzen für x . Der Unübersichtlichkeit wegen unterlassen wir dies und geben dafür ein numerisches Programm an.

Im Listing I ist das FORTRAN-Programm dieser beiden Funktionen p^1 und p^2 in Entry-Technik auf die Namen

```
FUNCTION P1 (R , XI , RN , M)
```

```
FUNCTION P2 (R , XI , RN , M)
```

zusammengestellt. Die obligaten Parameter entsprechen denen in $p_m^i(r, \xi, R_n)$, so daß wir keine näheren Beschreibungen mehr geben müssen.

Die abschließende Integration von (8.8) über r führen wir mit dem im Listing II angegebenen FORTRAN-Programm

```
FUNCTION CAUCH 1 (F , A , B , PX , EPSI)
```

aus. In dieser Funktionsroutine haben die Parameter folgende Bedeutung:

F : zu integrierende Funktion $f(x)$ einer Variablen

A : untere Grenze

B : obere Grenze

PX : Stelle des Pols bei Hauptwertintegration

EPSI : Genauigkeit.

Da unsere zu integrierenden Funktionen bei $r = R_n$ maximal sind und auf beiden Seiten dieses Maximums exponentiell abfallen, wählen wir die Grenzen unserer Integration von $r = 0$ bis $r = 2 \cdot R_n$ und als Genauigkeit $EPSI = 10^{-5}$. Wir haben hier keine Hauptwertintegration vorliegen. Insofern setzen wir $PX = R_n$. Die in (8.8) auftretende Summation über die Drehimpulszerlegung brechen wir in dem Moment ab, wenn der Zuwachs kleiner als 1 % der bisherigen Summe ist.

Mit diesem Verfahren berechnen wir die 10 x 10 Werte für verschiedene k_n $n = 1,\ldots,10$ um die Resonanzenergie des Augerübergangs (8.19) und 10 verschiedene Abstände R_m . Daraus bestimmen wir die über die Energie gemittelten Größen:

$$\overline{\Gamma}_{ff}(R_m) := \frac{1}{10} \sum_{n=1}^{10} \Gamma_F(k_n, R_m) \qquad m = 1,\ldots,10 \,. \tag{C.7}$$

Mit diesen Mittelwerten berechnen sich mit Hilfe der Spline-Interpolation alle übrigen Werte für (8.21), die den Abständen der verschiedenen Schalen entsprechen.

Das FORTRAN-Programm der Spline-Interpolation ist im Listing IV mit dem dazugehörigen Hilfsprogramm abgedruckt. Es hat den Namen

SUBROUTINE INTER (X , Y , NN , BX , BY , M)

Die formalen Parameter bedeuten:

Eingabegrößen:	X	X-Array der Dimension N	} mit den Störstellen
	Y	Y-Array der Dimension N	}
	NN	Dimension der Eingabearrays	
	M	maximale Anzahl der auszugebenden Wertepaare	
Ausgabegrößen:	BX	x-Werte der Interpolation (Array der Dimension M)	
	BY	y-Werte der Interpolation (Array der Dimension M)	
	M	genaue Anzahl der interpolierten Wertepaare ($M \leq 500$)	

Dieses Interpolationsprogramm setzt intern die genaue Anzahl der auszurechnenden Wertepaare gemäß der Krümmung der zu interpolierenden Kurve fest. Wir benutzen diese Werte, um durch eine lineare

Interpolation zu den erwünschten $R_n = d\sqrt{n}$ für unsere Zwecke zu gelangen.

Im Listing III führen wir zum Schluß noch die Programme zur Berechnung der Phononenfunktion $ph(m,T,\alpha_1,\alpha_2)$ nach (8.15) mit dem Namen

```
FUNCTION PHON (M , T , A1 , A2)
```

auf. Die Parameterliste entspricht der der Originalfunktion. In diesem Listing IV ist zusätzlich ein Programm zur Berechnung der Verteilungsdichte g^1 angegeben:

```
SUBROUTINE PZAHL (Z , S , G , R , MCON)
```

mit den

Eingabeparametern:

- S : Störstellenkonzentration
- G : Gitterkonstante
- R : Ortsvariable
- MCON : 0: muß 0 gesetzt werden beim 1. Aufruf und wenn S und G verändert wurden; 1: sonst.

Ausgabeparametern:

- Z : Wahrscheinlichkeit, ein Störzentrum vorzufinden.

```
      FUNCTION P1(R,XI,RN,M)
C*****R ORTSKOORDINATE
C*****XI VARIATIONS-PARAMETER
C*****RN ABSTAND DER ZENTREN
C*****M INDEX
      NF1=2
      NF2=1
      GOTO 20
      ENTRY P2(R,XI,RN,M)
      FF1=3
      NF1=2
      NF2=1
20    R1=R
      EPP1=0.5
      IF (M) 1,2,2
1     P1=0.
      P2=0.
      RETURN
2     IF (R.LE.EPP1)  R1=EPP1
      A=XI*XI*(R1*R1+RN*RN)
      B=-2*XI*XI*RN*R1
      A1=ABS(XI*(R1-RN))
      A2=XI*(R1+RN)
      KK=MOD(M,2)
      P1=0.
      P2=0.
      T=1.
      Z=FLOAT(M)/2.
      M1=IFIX(Z)+1
      IF (M) 3,3,8
3     IF (KK) 4,4,7
4     NNN=-2
5     N=NNN
      DO 6 M1=1,M1
      N=N+2
6     P1=P1+(-1)**((M-N)/2)*FAK(M+N)/(2**M*FAK((M+N)/2)*FAK((M-N)/2)
     +       *FAK(N)*(N+1))*(1-(-1)**(N+1))
      P2=P2+(-1)**((M-N)/2)*FAK(M+N)/(2**M*FAK((M+N)/2)*FAK((M-N)/2)
     +       *FAK(N)*(N+1))*(1-(-1)**(N+1))
      P1=P1*EXP(-XI*RN)
      P2=P2*EXP(-XI*RN)*XI*RN
      Y1=P1
      Y2=P2                                  "
      IF (R.LE.EPP1 .AND. R.GT.0.)  GOTO 18
      RETURN
7     NNN=-1
      GOTO 5
8     IF (KK) 9,9,17
9     NNN=-2
10    SS=0.
      N=NNN
      F=0.
      DO 15 KK=1,M1
      N=N+2
      N4=N+1
      DO 14 KK=1,N4
      SS=0.
      K=KK-1
      N5=2*(N-K)+NF1
      DO 13 II=1,N5
      I=II-1
      XV=1.
      IF (I.LT.1) GOTO 12
      DO 11 J=1,I
11    XV=XV*(2*(N-K)+NF1-J)
12    IF ((2*(N-K)+NF2-1).EQ.0 .AND.A2.EQ.0.) A2=1.
      SS=SS+XV*A2**(2*(N-K)+NF2-1)
13    CONTINUE
      S1=(-A)**K
      S2=B**(-N)
      S3=(-1)**((M-N)/2)*FAK(M+N)/
     +(2**M*FAK((M+N)/2)*FAK((M-N)/2)*FAK(N-K)*FAK(K))
      F1=SS*S1*S2*S3
      F=F+F1
14    CONTINUE
15    CONTINUE
      AB=EXP(-A2)
      AC=AB*F
      AC=AC/B
      P1=P1+2*T*AD
      P2=P2+2*T*AD
      A2=A1
      T=-T
      IT=IFIX(T)
      IF (T) 10,10,16
16    Y2=P1
      Y2=P2
      IF (F1.EQ.EPP1.AND.T.GT.0.) GOTO 5
      RETURN
17    NNN=-1.
      GOTO 10
18    P1=(Y2-Y1)/EPP1*R+Y1
      P2=(Y2-Y1)/EPP1*R+Y1
      RETURN
      END
```

Listing I

```
      FUNCTION CAUCH1(F,ALFA,BETA,ETA,EPSI)
C
C     PRINCIPAL VALUE INTEGRATION WITH GAUSSIAN QUADRATURE
C     PROGRAM BY  C E R N  , MODIFIED BY CBL / 22-08-1974
C     FLEXIBLE ACCURACY ABS(S16-S8)/(ABS(S16)+CAUCHY*EPSI) LT  EPSI
C     ACCURACY LIMIT IS REACHED WHEN INTERVAL BECOMES LT CONST*CLR.(A-B)
C
      DIMENSION W(12),X(12)
      LOGICAL K,L
      DATA CONST/1.E-8/
      DATA W
     1/0.101228536290376,  0.222381034453374,  0.313706645877887,
     2 0.362683783378362,  0.027152459411754,  0.062253523938648,
     3 0.095158511682493,  0.124628971255534,  0.149595988816577,
     4 0.169156519395003,  0.182603415044924,  0.189450610455069/
      DATA X
     1/0.960289856497536,  0.796666477413627,  0.525532409916329,
     2 0.183434642495650,  0.989400934991650,  0.944575023073233,
     3 0.865631202387832,  0.755404408355003,  0.617876244402644,
     4 0.458016777657227,  0.281603550779259,  0.095012509837637/
      FPE=EPSI
      CAUCH1=0.
      IF(ALFA.EQ.BETA)RETURN
      IF(ETA-ALFA) 5,6,60
   60 IF(BETA-ETA) 5,6,51
    6 WRITE(6,9)
      RETURN
    5 A=ALFA
      B=BETA
      K=.TRUE.
      GO TO 53
   51 K=.FALSE.
      IF(ETA-0.5*(ALFA+BETA))51,50,52
   50 C=0.5*(ETA-ALFA)
      GO TO 55
   51 C=ETA-ALFA
      A=ETA+C
      B=BETA
      GO TO 53
   52 C=BETA-ETA
      A=ALFA
      B=ETA-C
   53 L=.FALSE.
      ASSIGN 54 TO M
      GOTO 10
   54 IF(K)RETURN
      A=C
      B=C
      L=.TRUE.
      ASSIGN 55 TO M
      GOTO 10
   55 RETURN
   10 DELTA=CONST*ABS(A-B)
      AA=A
    5 Y=B-AA
    1 IF(ABS(Y).LE.DELTA)GOTO 2
    2 PE=AA+Y
      C1=0.5*(AA+BB)
      C2=C1-AA
      S8=0.0
      S16=0.0
      IF(L)GOTO 12
      DO 15 I=1,4
      C3=X(I)*C2
   15 S8=S8+W(I)*(F(C1+C3)+F(C1-C3))
      DO 16 I=5,12
      C3=X(I)*C2
   16 S16=S16+W(I)*(F(C1+C3)+F(C1-C3))
      GOTO 12
   62 C4=ETA-C1
      C5=ETA-C1
      DO 17 I=1,4
      C3=X(I)*C2
   17 S8=S8+W(I)*(F(C4+C3)+F(C5-C3)+F(C4-C3)+F(C5+C3))
      DO 18 I=5,12
      C3=X(I)*C2
   18 S16=S16+W(I)*(F(C4+C3)+F(C5-C3)+F(C4-C3)+F(C5+C3))
   12 S8=S8*C2
      S16=S16*C2
      IF(ABS(S16-S8).GT.EPSI*(ABS(S16)+FME))GOTO 4
      CAUCH1=CAUCH1+S16
      FME=ABS(CAUCH1)*EPSI
      AA=BB
      GOTO 1
    4 Y=0.5*Y
      IF(ABS(Y)-DELTA)6,6,,
    6 GOTO M,(54,55)
   10 Y=Y*2.
      ACC=ABS(S16-S8)/(ABS(S16)+FME)
      WRITE(6,7),ACC
      GOTO 3
    7 FORMAT(' FUNCTION CAUCHY: TOO HIGH ACCURACY REQUIRED,ACC=',E14.5)
    9 FORMAT(' FUNCTION CAUCHY: S EQUAL TO A OR B')
    3 END
```

Listing II

```
      FUNCTION PHON(M,T,A1,A2)
C
C*****M  SUMME DER ERZEUGTEN BZW. VERNICHTETEN PHONONEN
C
      P1=0.
      P2=0.
      P3=0.
      IOP=1
      P11=0.
      I11=IFIX(A1)
      I1=I11
      I2=M-I1
1     P1=SIGMA(I1,TEM,A1)*SIGMA(I2,TEM,A2)
      GOTO (2,3),IOP
2     I1=I1-1
      GOTO 4
3     I1=I1+1
4     I2=M-I1
      P3=P3+P1
      IF (P3.LE.1.E-150) GOTO 5
      ZUW=ABS((P3-P2)/P3)
      P2=P3
      IF (ZUW.LE.EPS) GOTO 5
      GOTO 1
5     I1=I11+1
      I2=M-I1
      P11=P11+P3
      IF (IOP.EQ.2) GOTO 6
      IOP=2
      P3=0.
      GOTO 1
6     PHON=P11
C
      RETURN
      END
```

```
      FUNCTION SIGMA(MU,TEMPER,AL)
C*****MU ERZEUGTE BZW. VERNICHTETE PHONONEN
C*****TEMPER TEMPERATUR IN GRAD KELVIN
C*****AL HUANG-RHYS-FAKTOR
C
      MUE=MU
      BETTA=1./(TEMPER*8.616E-5)
      ETOB=EXP(-BETTA*OME)
      XX=-AL*(1.+ETOB)/(1.-ETOB)
      E1=EXP(XX)
      AS=AL/(1.-ETOB)
      BS=AL*ETOB/(1.-ETOB)
      SUM=0.
      S=1.
      IF (MUE) 1,4,2
1     MUE=-MUE
      AT=AS
      AS=BS
      BS=AT
2     CONTINUE
      DO 3 I=1,MUE
      A=I
      S=S*AS/A
      IF(S.LT.1.E-250) S=0.
      IF(S.EQ.0.) GOTO 6
3     CONTINUE
      IF(S.EQ.0.) GOTO 6
      SUM=S
4     N=1
5     A=(N+MUE)*N
      S=S*AS*BS/A
      SUM=SUM+S
      IF(SUM.LT.1.E-150) GOTO 6
      ST=S/SUM
      TEST=ABS(ST)
      N=N+1
      IF(TEST.GT.1.E-11) GOTO 5
6     CONTINUE
      SIGMA=SUM*E1
C
      RETURN
      END
```

Listing III

```
3620=       SUBROUTINE PZARL(Z,S,G,R,MCOM)
3630=       ALGOL EXTERNAL ERROR
3640=       DATA PI/3.1415/
3650=       IF (MCOM.NE.0) GOTO 1
3660=       SS=S*1.E-24
3670=       XM=SS**(-0.3333333333)
3680=       XS=SQRT(XM)
3690=       RO=G*4.**(-0.3333333333)
3700=       C=1./(SQRT(2.*PI)*XS)
3710=       H=4.*PI/(PC*RC)
3720=       SS=0.
3730=       NGD=0
3740=       IXB=((XM-3.*XS)/G)**2.
3750=       IF (3.*XS.GE.XL) IXB=0
3760=3      DO 2 I=1,2000
3770=       X=SQRT(FLOAT(IXB+NGD*2000+I))*G
3780=       P=((X-XM)/XS)**2./2.
3790=       Y=X*X*H*C*EXP(-P)
3800=2      SS=SS+Y
3810=       NGD=NGD+1
3820=       IF (X.LT.XM+3.*XS) GOTO 3
3830=       AN=SS
3840=1      P=((R-XM)/XS)**2./2.
3850=       Z=F*F*H*C*EXP(-P)/AN
3860=       MCOM=1
3870=       RETURN
3880=       END
```

```
5260=       SUBROUTINE INTER(X,Y,NN,BX,BY,M)
5270=C
5280=       DIMENSION X(NN), Y(NN), BX(M), BY(M)
5290=       DIMENSION XVAL(2),YVAL(2),SCALES(4)
5300=       DIMENSION XSET(3,2),YSET(3,2)
5310=       SAVE13 = FF
5320=       NPOINT = SAVE13
5330=       IF (NPOINT-2) 5, 5, 10
5340=C      TWO-POINT OR ONE-POINT DATA SET. PASS DIRECTLY TO SLINT
5350=5      DX=(X(NN)-X(1))/(M-1)
5360=       BX(1)=X(1)
5370=       BY(1)=Y(1)
5380=       DO 1 I=2,M
5390=       BX(I)=X(1)+DX*(I-1)
5400=1      BY(I)=SLINT(BX(I),NN,X,Y)
5410=       GO TO 4000
5420=C      POINT SET MORE THAN TWO POINTS. INITIALIZE.
5430=   10  KENTIN = 1
5440=       KWORD = 2
5450=       BX(1) = X(1)
5460=       BY(1) = Y(1)
5470=       SAVE14 = 1.
5480=       SAVE15 = 1
5490=       IXIPX = 1.0
5500=       IYIPY = 1.0
5510=       IXSKIP = SAVE14
5520=       IYSKIP = SAVE15
5530=C      SET UP CONVERSION FACTORS FOR ROUTINE FAIR.
5540=       SCALES(1) =AMIN1 (X(1),X(NN))
5550=       SCALES(2) = 1.
5560=       SCALES(3) =AMIN1 (Y(1),Y(NN))
5570=       SCALES(4) = 1.
5580=       IXNEXT = 1
5590=       IYNEXT = 1
5600=C      BEGIN THE LOOP TO LOOP TO PROCESS DATA POINTS.
5610=       IF2 = NPOINT-1
5620=       DO 4000 II=1, IF2
5630=       IX = IXNEXT
5640=       IY = IYNEXT
5650=       IXNEXT = IX+IXSKIP
5660=       IYNEXT = IY+IYSKIP
5670=       NBELIT = 2
5680=C      COMPUTE INCREMENT BETWEEN X(IX) AND X(IXNEXT).
5690=C      ALSO BETWEEN Y(IY) AND Y(IYNEXT).
5700=       DELTAX = ABS (X(IX)-X(IXNEXT))
5710=       DELTAY = ABS (Y(IY)-Y(IYNEXT))
5720=C      TEST FOR DELTAX = ZERO.
5730=       IF (DELTAX) 20, 20, 25
5740=C      DELTAX = ZERO. SET TRIGGER TO AVOID DUPLICATE POINT.
5750=   20  NBELIT = 2
5760=C      TEST FOR DELTAY = ZERO.
5770=   25  IF (DELTAY) 30, 30, 26
5780=   26  GO TO (60,24), NBELIT
5790=C      DELTAY = ZERO
5800=   30  GO TO (60,2000), NBELIT
5810=C      STORE POINT IF DY AND DX
```

Listing IV

```
5820=    34 ASSIGN 7000 TO MOPE
5830=    35 BX(KWORD) = X(IXNEXT)
5840=       BY(KWORD) = Y(IYNEXT)
5850=C      UPDATE KWORD SUBSCRIPT.
5860=       KWORD = KWORD+1
5870=C      TEST FOR KWORD = 501
5880=       IF (KWORD-M-1) 45, 40, 40
5890=C      BX, BY ARE FULL. RETURN
5900=    40 NUM1 = KWORD-1
5910=C      REPEAT LAST POINT ON CURVE. RESET SUBSCRIPT.
5920=       BX(I) = BX(KWORD-1)
5930=       BY(I) = BY(KWORD-1)
5940=       KWORD = 2
5950=       KONTIN = 2
5960=    45 GO TO MORE, (135,170,7000,8000)
5970=    60 CONTINUE
5980=       MANY=M/NN+0.5
5990=       IF (MANY.LT.1) MANY=1
6000=       IF (MANY) 34, 34, 65
6010=    65 CONTINUE
6020=C      PAIR SCHEME IS NECESSARY.
6030=       IHALFZ = 1
6040=       IBLEND = 2
6050=C      TEST IF II = 1.
6060=       IF (II-1) 70, 70, 80
6070=    70 IBLEN1 = 1
6080=       GO TO 90
6090=C      TEST IF II = IM2.
6100=    80 IF (II-IM2) 90, 85, 85
6110=C      II IS NEITHER =1 OR IM2.
6120=    85 IHALFZ = 2
6130=       GO TO 70
6140=    90 CONTINUE
6150=       ITIMES = II+1-IHALFZ
6160=       DO 6000 L=1, IBLEN1
6170=       ITIMES = ITIMES-1
6180=       IXPT1 = I+ITIMES*IXSKIP
6190=       IYPT1 = I+ITIMES*IYSKIP
6200=       IXPT2 = IXPT1+IXSKIP
6210=       IYPT2 = IYPT1+IYSKIP
6220=       IXPT3 = IXPT2+IXSKIP
6230=       IYPT3 = IYPT2+IYSKIP
6240=       IF (X(IXPT1)-X(IXPT2)) 220, 610, 320
6250=C      TEST IF X VALUES ASCEND, DESCEND, OR NEITHER.
6260=   220 IF (X(IXPT2)-X(IXPT3)) 230, 610, 610
6270=C      DETERMINED THAT X VALUES ASCEND.
6280=   230 GO TO (231,232), L
6290=   231 INXRY1 = 1
6300=       GO TO 733
6310=   232 INXRY2 = 1
6320=       GO TO 733
6330=   320 IF (X(IXPT2)-X(IXPT3)) 610, 610, 330
6340=C      DETERMINED THAT X VALUES DESCEND.
6350=   330 GO TO (331,332), L
6360=   331 INXRY1 = 1
6370=       GO TO 734
6380=   332 INXRY = 1
6390=       GO TO 734
6400=C      TEST IF YVALUES ASCEND, DESCEND, OR NEITHER
6410=   610 IF (Y(IYPT1)-Y(IYPT2)) 620, 800, 720
6420=   620 IF (Y(IYPT2)-Y(IYPT3)) 630, 800, 800
6430=C      DETERMINED THAT Y VALUES ASCEND.
6440=   630 GO TO (631,632), L
6450=   631 INXRY1 = 2
6460=       GO TO 733
6470=   632 INXRY2 = 2
6480=       GO TO 733
6490=   720 IF (Y(IYPT2)-Y(IYPT3)) 800, 800, 730
6500=C      DETERMINED THAT Y VALUES DESCEND.
6510=   730 GO TO (731,732), L
6520=   731 INXRY1 = 2
6530=       GO TO 734
6540=   732 INXRY2 = 2
6550=       GO TO 734
6560=C      WORK ARRAYS FOR CURVE 1 AND CURVE 2.
6570=   733 KX = IXPT1
6580=       KXDEL = IXSKIP
6590=       KY = IYPT1
6600=       KYDEL = IYSKIP
6610=       GO TO 740
6620=   734 KX = IXPT3
6630=       KXDEL = -IYSKIP
6640=       KY = IYPT3
6650=       KYDEL = -IYSKIP
6660=   740 DO 745 K=1, 3
6670=       XSET(K,L) = X(KX)
6680=       YSET(K,L) = Y(KY)
6690=       KX = KX+KXDEL
6700=       KY = KY+KYDEL
6710=   745 CONTINUE
6720=       GO TO 6100
6730=C      DETERMINED THAT NEITHER X NOR Y VALUES ARE MONOTONIC.
6740=   800 GO TO (801,802), L
6750=   801 INXRY1 = 3
6760=       GO TO (34,8000), IBLEN1
6770=   802 INXRY2 = 3
6780=       GO TO (6000,8000,34), INXRY1
6790=  6000 CONTINUE
6800=       TOTAL = MANY+1
6810=       DELX = (X(IXNEXT)-X(IX))/TOTAL
6820=       DELY = (Y(IYNEXT)-Y(IY))/TOTAL
6830=       XVALUE = X(IX)
6840=       YVALUE = Y(IY)
6850=       SUBTOL = 0.0
6860=C      TEST FOR DATA EX, EY OVERFLOW DUE TO MANY
6870=C      IS TOO MANY.
6880=   135 IF (KWORD+MANY-M-1) 145, 145, 140
6890=C      MANY IS TOO MUCH, BREAK UP THE PROBLEM.
6900=C      COMPUTE TO LOOP UPPER INDEX.
6910=   140 M2 = I+1+IBLEN1
6920=C      REDUCE MANY BY M2 VALUE.
6930=       MANY = MANY-M2
6940=       ASSIGN 160 TO MOPE
6950=       GO TO 250
```

Listing IV

```
      145 ASSIGN 165 TO MORE
          M2 = MANY
C         COMPUTE FAIRING DATA.
      150 DO 155 J=1, M2
          SUBTOL = SUBTOL+1.0
          XVALUE = XVALUE+DELX
          XVAL(1) = XVALUE
          XVAL(2) = XVALUE
          YVALUE = YVALUE+DELY
          YVAL(1) = YVALUE
          YVAL(2) = YVALUE
          DO 1000 N=1, IBLEND
          GO TO (901,902), N
      901 GO TO (910,920,1000), INXRY1
      902 GO TO (910,920,1000), INXRY2
      910 CALL FAIR(1,1,XSET(1,N),YSET(1,N),XVALUE,YVAL(N),SCALES)
          GO TO 1000
      920 CALL FAIR(1,1,YSET(1,N),XSET(1,N),YVALUE,XVAL(N),SCALES)
     1000 CONTINUE
C         BLENDED SOLUTION.
     1010 XVAL(1) = (XVAL(1)-XVAL(2))*SUBTOL/TOTAL+XVAL(2)
          YVAL(1) = (YVAL(1)-YVAL(2))*SUBTOL/TOTAL+YVAL(2)
     1020 BX(KWORD) = XVAL(1)
          BY(KWORD) = YVAL(1)
C         UPDATE SUBSCRIPT.
          KWORD = KWORD+1
      155 CONTINUE
          GO TO MORE, (160,165)
      160 ASSIGN 135 TO MORE
          GO TO 40
C         TEST FOR KWORD = 501.
      165 IF (KWORD-500) 170, 170, 175
      170 ASSIGN 7000 TO MORE
          GO TO 35
      175 ASSIGN 170 TO MORE
          GO TO 40
C         TEST IF II = IM2
     7000 IF (II-IM2) 8000, 7005, 7005
C         TEST FOR PARTIALLY FULL ARRAYS.
     7005 IF (KWORD-2) 8000, 7010, 7015
C         BRANCH PER KONTIN
     7010 GO TO (7015,8000), KONTIN
     7015 ASSIGN 8000 TO MORE
          GO TO 40
     8000 CONTINUE
C         RESTORE SPECS THAT WERE ALTERED.
          M = NUM1
          BX(1)=X(1)
          BY(1)=Y(1)
     9000 RETURN
          END
```

```
      SUBROUTINE FAIR(M2,KK,AX,AY,XVAL,CURDOT,ARRAY)
      DIMENSION AX(4), AY(4), YVALUE(2)
      DIMENSION XINCH(3), YINCH(3), ARRAY(4)
      EQUIVALENCE (XINCH(1),X0), (XINCH(2),X1), (XINCH(3),X2)
      EQUIVALENCE (YINCH(1),Y0), (YINCH(2),Y1), (YINCH(3),Y2)
C                              SLOPEM APPROXIMATES TAN(PI/2)
      DATA SLOPEM /100000000./
      K = KK
      XVALUE = (XVAL-ARRAY(1))/ARRAY(2)
      DO 4020 I=1, M2
      GO TO (10,5), I
    5 K = K-1
   10 X0 = (AX(K)-ARRAY(1))/ARRAY(2)
      X1 = (AX(K+1)-ARRAY(1))/ARRAY(2)
      X2 = (AX(K+2)-ARRAY(1))/ARRAY(2)
      Y0 = (AY(K)-ARRAY(3))/ARRAY(4)
      Y1 = (AY(K+1)-ARRAY(3))/ARRAY(4)
      Y2 = (AY(K+2)-ARRAY(3))/ARRAY(4)
C     TEST FOR DATA CASE 0
      DO 20 J=1, 3
      IF (XVALUE-XINCH(J)) 20, 15, 20
   15 YVALUE(I) = YINCH(J)
      GO TO 4020
   20 CONTINUE
C     TEST FOR DATA CASE.
      IF (Y0-Y1) 45, 25, 140
C     TEST FOR CASE 1, 2, OR 3.
   25 IF (Y1-Y2) 35, 30, 35
C     TEST SAYS YVALUE VIA CASE 1, 2A, 3A, OR 4B.
   30 YVALUE(I) = Y1
      GO TO 4020
C     TEST SAYS YVALUE VIA CASE 2 OR 3.
C     TEST FOR CASE A OR B.
   35 IF (XVALUE-X1) 30, 30, 40
C     TEST SAYS YVALUE VIA CASE 2B, 3B, 6B, OR EE.
   40 YVALUE(I) = (Y2-Y1)*((XVALUE-X1)/(X2-X1))**2+Y1
      GO TO 4020
C     TEST SAYS YVALUE VIA CASE 4 , 5 ,OR 6
C     TEST FOR CASE 4, 5,OR6
   45 IF(Y1-Y2) 46,50,135
   46 SEGN=1.0
      GO TO 60
C     TEST SAYS YVALUE VIA CASE 4
C     TEST FOR ALR B.
   50 IF (XVALUE-X1) 55, 30, 30
C     TEST SAYS YVALUE VIA CASE 4A, 6A, 7A, OR 8A.
   55 YVALUE(I) = (YC-Y1)*((XVALUE-X0)/(X1-X0))**2+2.0*(Y1-YC)*
     1((XVALUE-X0)/(X1-X0))+Y0
      GO TO 4020
C     TEST SAYS YVALUE VIA CASE 5.1, 5.2, 5.3, 9.1, 9.2 OR 9.3
   60 IF (ABS ((Y1-YC)/(X1-XC))-ABS ((Y2-Y1)/(X2-X1))) 65, 130, 120
C     TEST SAYS YVALUE VIA CASE 5.1 OR 9.1
C     TEST FOR A OR B.
   65 IF (XVALUE-X1) 70, 30, 96
C     TEST SAYS YVALUE VIA CASE 5.1A OR 9.1A
   70 IOC = 1
```

Listing IV

```
      GO TO 5000
   71 AAA = (Y1-Y0)*SEGN/SLOPE
      AA = X1-X0
      A = AAA-AA
      B = 2.0*AA-AAA
      IF(A) 72,130,72
   72 IF (ABS (B/A)-1000000.0) 74, 130, 130
   74 C = X0-XVALUE
      SQRDOT = SQRT (B*B-4.0*A*C)
      BIGY = (-B+SQRDOT)/(2.0*A)
      IF (BIGY) 85, 85, 75
   75 IF (BIGY-1.0) 80, 85, 85
   80 YVALUE(I) = BIGY*(Y1-Y0)+Y0
      GO TO 4020
   85 BIGY = (-B-SQRDOT)/(2.0*A)
      IF (BIGY) 130, 130, 90
   90 IF (BIGY-1.0) 80, 130, 130
C     TEST SAYS YVALLE VIA CASE 5.2B OR 9.2B
   95 IGO = 2
      GO TO 5000
   98 B = (Y2-Y1)*SEGN/SLOPE
      A = X2-X1-B
      IF(A) 94,130,94
   94 IF (ABS (B/A)-1000000.0) 97, 130, 130
   97 CONTINUE
      Y0 = Y1
      Y1 = Y2
      X0 = X1
      GO TO 74
C     TEST SAYS YVALLE VIA CASE 5.1B OR 9.1B
  96 IGO = 3
      GO TO 5000
   99 B = (X2-X1)*SEGN*SLOPE
      A = Y2-Y1-B
      Y1 = Y1
      EIGX = (XVALUE-X1)/(X2-X1)
      GO TO 126
C     TEST SAYS YVALLE VIA CASE 5.2 OR 9.2
C     TEST FOR A OR B
  120 IF (XVALUE-X1) 125, 30, 95
C     TEST SAYS YVALLE VIA 5.2A OR 9.2A
  125 IGO = 4
      GO TO 5000
  127 AAA=(X1-X0)*SEGN*SLOPE
      AA = Y1-Y0
      A = AAA-AA
      B = 2.0*AA-AAA
      EIGX = (XVALLE-X0)/(X1-X0)
  126 YVALUE(I) = A*EIGX*EIGX+B*EIGX+Y0
      GO TO 4020
C     TEST SAYS YVALLE VIA CASE 5.3 OR 9.3
  130 YVALUE(I) = ((XVALLE-X0)/(X2-X0))*(Y2-Y0)+Y0
      GO TO 4020
C     TEST SAYS YVALLE VIA CASE 6 OR CASE 8
C     TEST FOR A OR B
  135 IF (XVALUE-X1) 55, 30, 40
C     TEST SAYS YVALLE VIA CASE 7, 8, OR 9
C     TEST FOR CASE 7, 8, OR 9
  140 IF (Y1-Y2) 135, 145, 141
  141 SEGN = -1.0
      GO TO 60
C     TEST SAYS YVALLE VIA CASE 7
C     TEST FOR A OR B
  145 IF (XVALUE-X1) 55, 30, 30
 5000 RADIAN = (ATAN (ABS ((Y1-Y0)/(X1-X0)))+ATAN (ABS ((Y2-Y1)/
     1(X2-X1)))-ATAN (ABS ((Y2-Y0)/(X2-X0))))
      IF (RADIAN-1.5707962) 5002, 5001, 5001
 5001 SLOPE = SLOPEM
      GO TO 5003
 5002 SLOPE = TAN (RADIAN)
 5003 CONTINUE
      GO TO (71,98,99,127), IGO
 4020 CONTINUE
      GO TO (4025,4030), M2
 4025 CURDOT = YVALUE(1)*ARRAY(4)+ARRAY(3)
      GO TO 849
 4030 WEIGHT = (X2-XVALUE)/(X2-X1)
      CURDOT = (YVALLE(2)*WEIGHT+YVALUE(1)*(1.0-WEIGHT))*ARRAY(4)+ARRAY
     13)
  849 RETURN
      END
```

Listing IV

Anhang D: Elektronische Matrixelemente der Ionisationsprozesse $(F^* \longrightarrow c)$, $(F \longrightarrow c)$ und $(F' \longrightarrow c)$

Da wir bei diesen Übergängen die Spinanteile der Elektronenzustände mitberücksichtigen müssen, erhalten wir aus (11.2):

$$I_i^{\pi} := M_{c_i}^2 + M_{ex_i}^2 + \left| M_{c_i} - M_{ex_i} \right|^2 \qquad i = F, F^*, F' \tag{D.1}$$

wobei M_c den Coulombwechselwirkungsterm und

M_{ex} den Austauschwechselwirkungsterm darstellt.

Approximieren wir die Endzustände durch

$$\Psi_c(r,k) = \frac{1}{V^{1/2}} U_k(r) \cong V^{-\frac{1}{2}}, \tag{D.2}$$

was nach Huang-Rhys /3/ für $K \cdot a \ll 1$ ($a \equiv$ Ausdehnung der gebundenen Wellenfunktion) getan werden kann, und entwickeln wir die Ausgangswellenfunktion $\Psi_c(r,k)$ und das Coulombpotential nach Kugelflächenfunktionen, erhalten wir für das F^*-Zentrum nach der Integration über die Raumwinkel:

$$M_{c_{F^*}} = F_0(k) + G_0(k)\, Y_{10}^*(\Omega_k) \tag{D.3}$$

mit: (D.4)

$$F_0(k) := \chi_{F^*}^1 \int_0^\infty r^2 j_0(kr) \left[\frac{1}{r} \int_0^r r'^2 (1-\gamma r') e^{-\gamma r'} dr' + \int_r^\infty r' (1-\gamma r') e^{-\gamma r'} dr' \right] dr$$

$$G_0(k) := \chi_{F^*}^2 \int_0^\infty r^2 j_1(kr) \left[\frac{1}{r^2} \int_0^r r'^4 e^{-\gamma r'} dr' + r \int_r^\infty r' e^{-\gamma r'} dr' \right] dr \tag{D.5}$$

$$\chi_{F^*}^1 := 32\pi^2 e^2 \gamma^{3/2} (1+a^2)^{-1/2} e^{-i\vec{k}\vec{R}_c}$$

$$\chi_{F^*}^2 := i \frac{32\pi^2}{\sqrt{3}} e^2 \gamma^{5/2} a (1+a^2)^{-1/2} e^{-i\vec{k}\vec{R}_c} \tag{D.6}$$

Wie detaillierte Rechnungen zeigen, gilt in der angegebenen Näherung (D.2) für den Austauschterm:

$$M_{ex_{F^*}} = M_{c_{F^*}} . \tag{D.7}$$

In (11.4) müssen wir über alle Richtungen des Impulsraumes summieren:

$$\tilde{I}^{SI}_{F^*} := 2 \int |M_{c_{F^*}}|^2 f'(k', E^{ex}) \, d\Omega_{k'} . \tag{D.8}$$

Berücksichtigen wir die Verteilungsdichte f'(k) gemäß (10.6) und führen die Winkelintegration über Ω_k aus, erhalten wir mit dem elektrischen Feld in z-Richtung für (D.8):

$$\tilde{I}^{SI}_{F^*} = 2 \bar{I}^{SI}_{F^*}(k', v_3) \, f^1_{F^*}(k', E^{ex}) \tag{D.9}$$

mit:

$$\bar{I}^{SI}_{F^*}(k', v_3) := \left\{ 4\pi |F_0(k')|^2 + |G_0(k')|^2 \right\} \left(1 + \frac{\beta^2}{6} (\hbar v_3 k')^2 \right) + \frac{2}{15} (\beta \hbar v_3 k')^2 |G_0(k')|^2 \tag{D.10}$$

$$f^1_{F^*}(k', E^{ex}) := \frac{1}{k'_0} e^{-\beta \left(\frac{\hbar k^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* v_3^2 (E^{ex}) \right)} . \tag{D.11}$$

Entsprechend errechnen sich diese Anteile für das F- und F'-Zentrum. Wir geben aus Platzgründen nur die Ergebnisse an:

(a) <u>F-Zentrum:</u>

$$M_{c_F} = F_1(k) \tag{D.12}$$

$$\tilde{I}^{SI}_{F} = 2 \bar{I}^{SI}_{F}(k', v_3) \, f^1_{F}(k', E^{ex}) \tag{D.13}$$

wobei die Definitionen gelten:

$$F_1(k) = \alpha_F^1 \int_0^\infty r^2 j_0(kr) \left[\frac{1}{r} \int_0^r r'^2 (1+\alpha r') e^{-\alpha r'} dr' + \int_r^\infty r' (1+\alpha r') e^{-\alpha r'} dr' \right] dr \qquad (D.14)$$

$$\alpha_F^1 := \frac{32\pi^2}{\sqrt{7}} e^2 \alpha^{3/2} e^{-i\vec{k}\vec{R}_n} \qquad (D.15)$$

$$\underline{\underline{I}}_F^{SE}(k', v_D) := 4\pi \left(1 + \beta^2 \frac{(\hbar k' v_D)^2}{6} \right) |F_1(k')|^2 \qquad (D.16)$$

$$f_F^1(k', E^{ex}) \equiv f_{F+}^1(k', E^{ex}) = f_{F'}^1(k', E^{ex}) . \qquad (D.17)$$

(b) F'-Zentrum:

$$M_{c_{F'}} = F_2(k) \qquad (D.18)$$

$$\underline{\underline{\tilde{I}}}_{F'}^{SE} = 2 \underline{\underline{I}}_{F'}^{SE}(k', v_D) f_{F'}^1(k', E^{ex}) \qquad (D.19)$$

mit den Abkürzungen:

$$F_2(k) := \alpha_{F'}^1 \int_0^\infty r^2 j_0(kr) \left[\frac{1}{r} \int_0^r r'^2 (1+\delta r') e^{-\delta r'} dr' + \int_r^\infty r' (1+\delta r') e^{-\delta r'} dr' \right] dr \qquad (D.20)$$

$$\alpha_{F'}^1 := \frac{(\alpha\delta)^{3/2}}{7\pi} \left(\frac{8}{(\alpha+\delta)^3} + \frac{24\alpha\delta}{(\alpha+\delta)^5} \right) \frac{32\pi^2}{\sqrt{7}} e^2 \delta^{3/2} e^{-i\vec{k}\vec{R}_n}$$

$$\underline{\underline{I}}_{F'}^{SE}(k', v_D) := 4\pi \left(1 + \beta^2 \frac{(\hbar k' v_D)^2}{6} \right) |F_2(k)|^2 . \qquad (D.21)$$

Die Integration der in (D.4), (D.5), (D.14) und (D.20) durch [---] angegebenen Funktionen liefert uns:

$$\tilde{f}^0(r) := e^{-\delta r}\left(\frac{r}{\delta} + \frac{3}{\delta^2} + \frac{4}{\delta^3}\frac{1}{r}\right) - \frac{4}{\delta^3}\frac{1}{r} \tag{D.22}$$

$$\tilde{g}^0(r) := \frac{24}{\beta^5}\frac{1}{r^2} - e^{-\beta r}\left(\frac{3}{\beta^2}r + \frac{12}{\beta^3} + \frac{24}{\beta^4}\frac{1}{r} + \frac{24}{\beta^5}\frac{1}{r^2}\right) \tag{D.23}$$

$$\tilde{f}^1(r) := \frac{8}{\alpha^3}\frac{1}{r} - e^{-\alpha r}\left(\frac{r}{\alpha} + \frac{5}{\alpha^2} + \frac{8}{\alpha^3}\frac{1}{r}\right) \tag{D.24}$$

$$\tilde{f}^2(r) := \frac{8}{\delta^3}\frac{1}{r} - e^{-\delta r}\left(\frac{r}{\delta} + \frac{5}{\delta^2} + \frac{8}{\delta^3}\frac{1}{r}\right). \tag{D.25}$$

Mit diesen Ausdrücken setzen sich die großgeschriebenen Funktionen F_o , G_o , G_1 und G_2 aus Termen der Art

$$\int_V x^\nu j_\ell(ax)\,dx \qquad \text{und} \qquad \int_V e^{-bx} x^\nu j_\ell(ax)\,dx \tag{D.26}$$

zusammen. Beachten wir weiter den Zusammenhang

$$j_\ell(ax) = \sqrt{\frac{\pi}{2ax}}\; J_{\ell+\frac{1}{2}}(ax) \tag{D.27}$$

und die in /39/ angegebenen Integrale

$$\int_0^\infty x^\nu J_{\ell'}(ax)\,dx = 2^\nu\, a^{-\nu-1}\,\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}(1+\ell'+\nu)\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}(1+\ell'-\nu)\right)} \tag{D.28}$$

für $-\nu-1 < \mu < \frac{1}{2}$ und $a > 0$

$$\int_0^\infty e^{-bx}\, J_{\ell'}(ax)\, x^{\nu-1}\, dx = (a^2+b^2)^{-\frac{1}{2}\nu}\, \Gamma(\ell'+\nu)\, P_{\nu-1}^{-\ell'}\left(\frac{b}{\sqrt{a^2+b^2}}\right) \tag{D.29}$$

für $b>0,\ a>0$ und $\nu+\ell' > 0$

mit $$P_n^m(z) := \frac{1}{\Gamma(1-m)}\left(\frac{1+z}{1-z}\right)^{\frac{m}{2}} {}_2F_1\left(-n, n+1, 1-m, \frac{1-z}{2}\right) \tag{D.30}$$

lassen sich die Funktionen F_0, G_0, F_1 und F_2 mit den Definitionen

$$\Xi_0(k) := \sqrt{\frac{\pi}{4}}\, \frac{\Gamma(3/2)}{\Gamma(2)}\, \frac{1}{k} \tag{D.31}$$

$$Z_i(\eta,\xi,k) := \frac{\Gamma(n+i)}{\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, k\, (\xi^2+k^2)^{n+\frac{1}{2}}}\, P_{n-\frac{1}{2}}^{-i+\frac{1}{2}}\left(\frac{\xi}{\sqrt{\xi^2+k^2}}\right) \quad i=1,2 \tag{D.32}$$

schreiben:

$$F_0(k) = \chi_{F\pi}^1 \left\{ \frac{1}{\gamma} Z_1(3,\gamma,k) + \frac{3}{\gamma^2} Z_1(2,\gamma,k) + \frac{4}{\gamma^3} Z_1(1,\gamma,k) \right\} \tag{D.33}$$

$$G_0(k) = \chi_{F\pi}^2 \left\{ \frac{24}{\beta^5} Z_0(k) - \frac{3}{\beta^2} Z_2(3,\beta,k) - \frac{12}{\beta^3} Z_2(2,\beta,k) - \right. \tag{D.34}$$

$$\left. - \frac{24}{\beta^4} Z_2(1,\beta,k) - \frac{24}{\beta^5} Z_2(0,\beta,k) \right\}$$

$$F_1(k) = -\chi_F^1 \left\{ \frac{1}{\alpha} Z_1(3,\alpha,k) + \frac{5}{\alpha^2} Z_1(2,\alpha,k) + \frac{8}{\alpha^3} Z_1(1,\alpha,k) \right\} \tag{D.35}$$

$$F_2(k) = -\chi_{F'}^1 \left\{ \frac{1}{\delta} Z_1(3,\delta,k) + \frac{5}{\delta^2} Z_1(2,\delta,k) + \frac{8}{\delta^3} Z_1(1,\delta,k) \right\}. \tag{D.36}$$

Bei dieser Auswertung wurde von periodischen Randbedingungen für den Kristall Gebrauch gemacht, so daß

$$\int_{V_k} x j_0(kx)\, dx = \int_{V_k} \sin(kr)\, dr \equiv 0 \qquad \text{(D.37)}$$

gesetzt werden kann.

Im Listing V sind die elementaren Funktionen (D.31) und (D.32) in einem FORTRAN-Programm in ENTRY-Technik angegeben. Sie haben die Namen

```
FUNCTION  ZØ (HK)
FUNCTION  Z1 (N , XI , HK)
FUNCTION  Z2 (N , XI , HK)
```

Die Parameter entsprechen den Originalvariablen in (D.31) und (D.32).

Die beiden Integrationen des Ausdruckes (11.5) führen wir numerisch mit dem in Anhang C angegebenen Integrationsprogramm CAUCH 1 $\left(\int_0^{E'} dE\right)$ und einem Gauß-Laguerre-Integrationsverfahren $\left(\int_0^{\infty} dE'\right)$ durch. In diesem letzten Verfahren wird ein Integral der Form

$$I = \int_0^{\infty} e^{-\alpha x} f(x)\, dx \equiv \sum_{\ell=0}^{\infty} w_\ell\, f(x_\ell) \qquad \text{(D.38)}$$

durch eine Summe über gewichtete Stützwerte approximiert. Das dazugehörige Rechenprogramm ist ebenfalls im Programmlisting V angegeben und hört auf den Namen

```
SUBROUTINE GALAG (A , NS , X , W)
```

mit den Parametern:

Eingabegrößen: A : a Abfallparameter

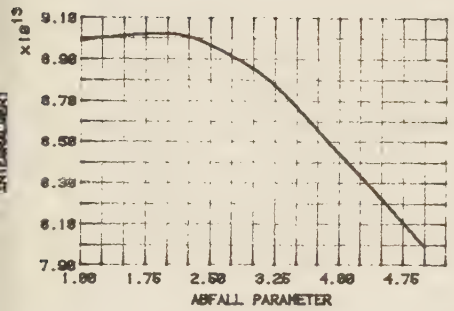
NS : N_{st} Stützstellenanzahl ($4 \leq NS \leq 32$)

Ausgabegrößen: X : Array der Dimension NS $\equiv x_\ell$ in (D.38)

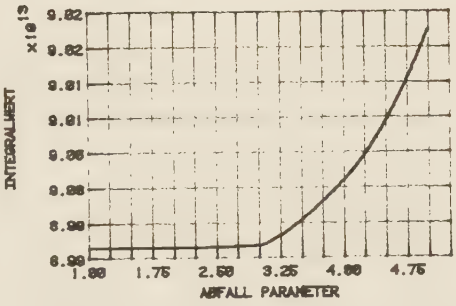
W : Array der Dimension NS $\equiv W_\ell$ in (D.38)

In diesem Programm müssen die Eingabeparameter so lange variiert werden, bis der Integralwert I stabil wird. In Abbildung 24 ist dieses Verfahren an einem Beispiel gezeigt. Man sieht daraus, wie

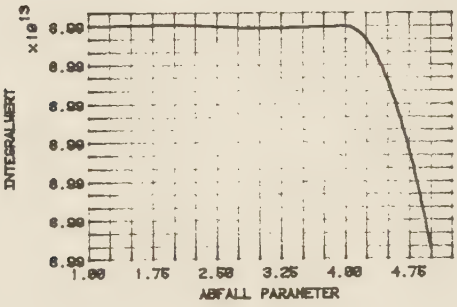
sich bei höherer Stützstellenanzahl ein breiterer Stabilitätsbereich ausbildet und die Genauigkeit des Integralwertes zunimmt.



$N_{st} = 8$



$N_{st} = 12$



$N_{st} = 28$

Abb. 24: Gauß-Laguerre-Integrationsverfahren (Beispiel)

Zum Gauß-Laguerre-Verfahren ist noch anzumerken, daß der Integrand durch ein Polynom vom Grade N_{St} approximiert und anschließend integriert wird. Insofern läßt sich mit diesem Verfahren ein Polynom vom Grad $n \leq N_{St}$ exakt lösen.

```
      FUNCTION Z1(N,XI,HK)
      DATA PI/3.141593/
      N1=1
      A1=-0.5
      GOTO 1
      ENTRY Z0(HK)
      Q1=SQRT(PI/4.)
      IF (HK.EQ.0.) HK=1.E-9
      C1=C1*GAMMA(1.5)/(GAMMA(2.)*HK)
      Z0=C1
      RETURN
      ENTRY Z2(N,XI,HK)
      N1=2
      A1=-1.5
1     A=X1*X1+HK*HK
      Q1=SQRT(PI/2.)/SQRT(HK*A**(FLOAT(N)+0.5))
      Q1=Q1*GAMMA(FLOAT(N+N1))*PLEG(A1,FLOAT(N)-0.5,XI/SQRT(A))
      Z1=Q1
      Z2=C1
      RETURN
      END

      FUNCTION PLEG(AC,AL,X)
      ALGOL EXTERNAL HYGE
      IF (X.EQ.1.) X=0.999999999
      Q1=((1.+X)/(1.-X))**(AC/2.)/GAMMA(1.-AC)
      CALL HYGE(-AC,AL+1.,1.-AC,(1.-X)/2.,1.E-7,-1,100,Q2,JJ)
      PLEG=Q1*Q2
      RETURN
      END
```

```
      SUBROUTINE GALAG(A,NS,X,W)
C*****A ABFALL-PARAMETER
C*****NS ANZAHL DER STUETZSTELLEN
C*****X(NS) AUSGABE-ARRAY
C*****Y(NS) AUSGABE-ARRAY
C*****ACHTUNG: IN COMMON-BLOCK GALA LIEGEN WERTE, DIE ZUERST ZUR
C              VERFUEGUNG GESTELLT WERDEN MUESSEN
C
      INTEGER NOLL(5)
      DIMENSION X(NS),W(NS)
      COMMON/GALA/ Y(96,2)
      DATA NOLL/4,12,20,28,32/
      I6=6
      I=0
      NK=0
      K=K+1
      NK=NK+NOLL(K)
      IF(NS-NOLL(K)) 3,3,2
      IF(K.LT.5) GO TO 1
      NSEX=NOLL(K)
      ID=NK-NSEX
      PROBE=0.
      DO 4 I=1,NSEX
      IB=ID+I
      YB=Y(IB,2)/A
      W(I)=YB*EXP(Y(IB,1))
      X(I)=Y(IB,1)/A
      PROBE=PROBE+YB
      CONTINUE
      PROBE=1./A-PROBE
      IF (PROBE.LE.1.E-1) GOTO 5
      WRITE(IAUS,6) NSEX,PROBE
      RETURN
C
      FORMAT(1H0,12,3X'LAGUERRE STUETZSTELLEN       PROBE'3X,E20.11)
C
      END
```

Listing V

Anhang E: Elektronisches Matrixelement von $W^{\beta}(F,F^*/c,F')$

Wie bei der Berechnung von $W^{\beta}(F,F^*/c,F^*)$ gilt für den elektronischen Anteil:

$$|M_{ii}^{e}|^2 = |M_c|^2 + |M_{ex}|^2 + |M_r - M_{ex}|^2 \cong \alpha_r |M_c|^2 \qquad (E.1)$$

Mit den in Abschnitt 8 und 9 angegebenen Wellenfunktionen schreibt sich M_c nach Ausnutzung von Orthogonalitätseigenschaften der Wellenfunktionen:

$$M_c = \frac{\langle \psi_{k_2}(x_1,w) | \psi_{k_2}(x_1,\delta)\rangle}{(1+\alpha^2)^{1/2}} \left[\langle \psi_F(x)\psi_c(x-\vec{R}_n,\beta)| e^2 C(x,w) | \psi_{k_1}(x)\psi_{k_2}(w,\vec{R}_n)\rangle + \right.$$

$$\left. + \alpha \langle \psi_F(w)\psi_c(w-\vec{R}_n,\beta)| e^2 C(x,w) | \psi_{k_1}(w)\psi_{k_2}(x,\vec{R}_n)\rangle \right] \qquad (E.2)$$

$$=: w\,(M_1 + M_2)\,.$$

Der Vorfaktor berechnet sich zu

$$W = \frac{(2\delta)^{3/2}}{4\pi(1+\alpha^2)^{1/2}} \left(\frac{8}{(\alpha+\delta)^3} + \frac{24\alpha\delta}{(\alpha+\delta)^5} \right), \qquad (E.3)$$

während die beiden anderen Größen mit Hilfe der Funktionen (B.6), (B.7), (B.8), (B.9), (B.12) und (B.14) und den üblichen Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen lauten:

$$M_1 = V_1^{t'} e^{-ib\vec{R}_n} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} Y_{\ell 0}^{*}(\hat{R}_k) \int_0^{\infty} r^2 j_{\ell}(kr) f_2(r,\alpha,\delta) c_{\ell 0} \left[p_{\ell}^{1}(r,\delta,R_n) + p_{\ell}^{2}(r,\delta,R_n) \right] dr \qquad (E.4)$$

$$M_2 = V_2^{t'} e^{-ib\vec{R}_n} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} Y_{\ell 0}^{*}(\hat{R}_k) \int_0^{\infty} r^2 j_{\ell}(kr) f_1(r,\alpha,\beta) \left[c_{\ell+1,0}\, a_{\ell 0} \left(p_{\ell+1}^{1}(r,\delta,R_n) + p_{\ell+1}^{2}(r,\delta,R_n) \right) \right.$$

$$\left. + b_{\ell 0}\, c_{\ell-1,0} \left(p_{\ell-1}^{1}(r,\delta,R_n) + p_{\ell-1}^{2}(r,\delta,R_n) \right) \right] dr \qquad (E.5)$$

mit den Vorfaktoren

$$V_1^{F'} := \frac{16\pi}{7}\sqrt{2}\, e^2 \alpha^{3/2} \gamma^{3/2} \delta^{3/2}$$

$$V_2^{F'} := \frac{16\pi}{21}\sqrt{3/3}\, e^2 \alpha^{3/2} \beta^{5/2} \delta^{3/2}. \qquad \text{(E.6)}$$

Nach Integration über Ω_k erhalten wir nach (E.1) mit (E.3), (E.4) und (E.5) für den elektronischen Gesamtanteil von $W^A(F,F^*/c,F')$:

$$I_{F'}(k,P_n) := \int |M_{F'}^e|^2 \, d\Omega_k = \qquad \text{(E.7)}$$

$$= W^2 \chi_{F'} \sum_{\ell=0}^{\infty} \Bigg[\int_0^{\infty} r^2 j_\ell(kr) \Big\{ V_1^{F'} f_2(r,\alpha,\gamma)\, c_{\ell 0} \big[p_\ell^1(r,\delta,P_n) + p_\ell^2(r,\delta,P_n) \big]$$

$$+ V_2^{F'} f_1(r,\alpha,\beta) \big[a_{\ell 0}\, c_{\ell+1,0} \{ p_{\ell+1}^1(r,\delta,P_n) + p_{\ell+1}^2(r,\delta,P_n) \} + b_{\ell 0}\, c_{\ell-1,0} \cdot$$

$$\cdot \big[p_{\ell-1}^1(r,\delta,P_n) + p_{\ell-1}^2(r,\delta,P_n) \big] \big] \Big\} dr \Bigg]^2$$

$$=: \chi_{F'} \sum_{\ell=0}^{\infty} I_\ell^{F'}(k,P_n).$$

Anhang F: Kristall- und Rechenparameter von KI

Wir listen tabellarisch alle in den Berechnungen vorkommenden Parameter des Kristalls KI auf:

Name	Bezeichnung	Werte	Quelle
Gitterkonstante	d	3.533 Å	/66/
Ionisierungsenergie des F-Zentrums	U_F	-1.875 eV	/67/
Ionisierungsenergie des F* -Zentrums	U_{F^*}	-0.11 eV	/67/
Ionisierungsenergie des F'-Zentrums	$U_{F'}$	-0.35 eV	/68/
Variationsparameter	α	0.87 $Å^{-1}$	/6/
	β	0.72 $Å^{-1}$	/33/
	γ	0.81 $Å^{-1}$	/33/
	δ	0.75 $Å^{-1}$	/6/
	$\lambda = a$	93	/33/
effektive Elektronenmasse	m	0.47 m_e	/67/
Phononenenergie des opt. long. Zweiges		0.011 eV	/67/
Hyang-Rhys-Faktoren	$\alpha^2_F \rightarrow F$	54	Für diese Größen liegen noch keine Werte für KI vor. Deshalb schätzten wir sie nach den Arbeiten /10,3,47,69/.
	$\alpha^2_F \rightarrow c$	19	
	$\alpha^2_{F'} \rightarrow c$	20	
	$\alpha^2_c \rightarrow F'$	20	
	$\alpha^2_c \rightarrow F$	19	
	$\alpha^2_c \rightarrow c$	0	
	$\alpha^2_F \rightarrow c$	25	
	$\alpha^2_c \rightarrow F$	56	

Tabelle 10: Kristallparameter von KI

Anhang G: Normierungsfaktor der verschobenen Maxwell-Boltzmann-Verteilung

Die verschobene Boltzmann-Verteilung schreibt sich nach (10.8)

$$f(k) = \frac{n_L}{n_0'} e^{-\beta \frac{(\hbar k^2 - m^* v_D)^2}{2m^*}}, \tag{G.1}$$

während die gewöhnliche Verteilung durch

$$f_0(k) = \frac{n_L}{n_0} e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}} \tag{G.2}$$

gegeben ist. Nach Anhang A und den Betrachtungen von Abschnitt 6 müssen wir fordern:

$$n_L = \int_{V_{Br}} \mathcal{D}'(k) f_0(k)\, dk = \int_{V_{Br}} \mathcal{D}'(k) f(k)\, dk . \tag{G.3}$$

Mit (G.1) und (G.2) gewinnen wir aus (G.3) eine Bestimmungsgleichung für n_0' :

$$\frac{n_0'}{n_0} = \left(2\pi \int_0^\infty \int_0^\pi k f(k) \sin\vartheta_k \, d\vartheta_k \, dk\right)\left(4\pi \int_0^\infty k f_0(k)\, dk\right)^{-1}. \tag{G.4}$$

Mit dem Fehlerintegral

$$\Phi(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \tag{G.5}$$

berechnet sich das Verhältnis (G.4)

$$\frac{n_0'}{n_0} = \sqrt{\frac{\pi}{2\beta m}} \frac{1}{v_D} \Phi\left(\sqrt{\frac{m}{2}\beta}\, v_D\right). \tag{G.6}$$

Es ist klar, daß im feldfreien Fall ($V_D = 0$) dieses Verhältnis 1 werden muß. Mit Hilfe der de l'Hospitalschen Regel läßt sich dies auch zeigen, wenn wir

$$x := \sqrt{\tfrac{m}{2}\beta}\, V_D$$

einführen. Es gilt:

$$\lim_{V_D \to 0} \frac{n_0'}{n_0} = \sqrt{\frac{\pi}{2\beta m}} \lim_{V_D \to 0} \frac{\frac{d}{dV_D}\Phi(x)}{\frac{d}{dV_D} V_D} = \sqrt{\frac{\pi}{2\beta m}} \sqrt{\tfrac{m}{2}\beta}\, \frac{2}{\pi} \lim_{V_D \to 0} e^{-\beta \frac{m}{2} V_D^2} = 1. \qquad (G.7)$$

Anhang H: Elektronische Anteile bei Auger-Rekombinationen

Für (12.1) erhalten wir entsprechend Abschnitt D:

$$I_i^{AR} = M_{c_i}^2 + M_{ex_i}^2 + |M_{c_i} - M_{ex_i}|^2 \qquad (H.1)$$

Zur Berechnung dieser Prozesse approximieren wir die Anfangszustände durch konstante Funktionen (D.2). Auch hier gilt $M_{c_i} = M_{ex_i}$, so daß (H.1) einfacher zu berechnen ist:

$$I_i^{AR} = 2 M_{c_i}^2 \qquad (H.2)$$

Mit der Entwicklung des Coulombpotentials und der Endwellenfunktion $\Psi_c(\alpha, k)$ erhalten wir nach Ausführung der Winkelintegrationen für das F^*-Zentrum:

$$M_{c_{F^*}} = P_0(k) + Q_0(k)\, Y_{10}(\Omega_k) \qquad (H.3)$$

mit den Identitäten

$$P_0(k) \equiv F_0(k)$$
$$Q_0(k) \equiv G_0(k) \qquad \text{(siehe Anhang D)} \qquad (H.4)$$

Da $M_{c_{F^*}}$ unabhängig von den Quasiimpulsen k' bzw. k" ist, die über die Verteilung (10.6) asymmetrisch bei den Winkelintegrationen berücksichtigt werden, läßt sich die Winkelintegration bezüglich Ω_k unmittelbar ausführen. Wir erhalten für die in (12.7) eingehenden Größen:

$$\bar{I}_{F^*}^{AR} := 4\pi \left(|P_0(k)|^2 + |Q_0(k)|^2 \right) \qquad (H.5)$$

$$\bar{I}_{F}^{AR} := 4\pi \, |F_1(k)|^2 \qquad (H.6)$$

$$\bar{\bar{I}}_{F'}^{\Lambda R} := 4\pi \left| F_2(k) \right|^2 . \tag{H.7}$$

Die Winkelintegration der Verteilung (10.6) liefert uns

$$f^2(k, E^{ex}) := \frac{1}{4\pi} \int f'(k, E^{ex})\, d\Omega_k \tag{H.8}$$

$$= \frac{1}{n_0'} \left(1 + \frac{\beta^2}{6} \left(\hbar/\mu\, E^{ex} k\right)^2\right) e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* (\mu E^{ex})^2\right)} .$$

Anhang I: Einteilchenübergänge an Farbzentren in KI

In Tabelle 11 stellen wir die numerischen Werte der Einteilchenübergänge unseres F-F'-Zentren Reaktionssystems zusammen.

Die in dieser Tabelle angegebenen Werte errechneten wir mit den von I.Rojas /47/ angegebenen Formeln.

Mit der Photonenstromstärke $\mathcal{J}_0 \left[cm^{-2} \, sec^{-1} \right]$ erhalten wir für den Übergang $F \longrightarrow F^*$: $W(F^*,F) = c_F(F^*,F) \, \mathcal{J}_0$. Vergleiche der Rekombinationswahrscheinlichkeit $W^K(F^*,c)$ mit ähnlichen Kristallen wie KBr zeigen, daß die hier berechneten Werte zu klein ausgefallen sind /57,48/. Wir verwenden aus diesem Grund die in der Spalte 9 angepaßten Werte für diesen Übergang, bis bessere Werte vorliegen. Dasselbe gilt für die Rekombination mit dem F-Zentrum.

Temperatur	$C_F(F^*,F)$ cm^2	$W^S(F,F^*)$ sec^{-1}	$W^K(F,F^*)$ sec^{-1}	$W^K(c,F^*)$ sec^{-1}	$W^K(F^*,c)$ cm^3/sec	$W^K(F',c)$ cm^3/sec	$W^K(c,F')$ sec^{-1}	$W(F^*,c)$ cm^3/sec	$W(F',c)$ cm^3/sec
10^o K	$3.8\ 10^{-16}$	$1.26\ 10^{6}$	$6.78\ 10^{3}$	$3.25\ 10^{-49}$	$1.28\ 10^{-12}$	$2.43\ 10^{-12}$	0.0		
50^o K	$3.63\ 10^{-16}$	$1.26\ 10^{6}$	$1.41\ 10^{4}$	$2.32\ 10^{-2}$	$3.62\ 10^{-9}$	$1.84\ 10^{-12}$	$7.59\ 10^{-30}$		
100^o K	$3.18\ 10^{-16}$	$1.27\ 10^{6}$	$4.90\ 10^{5}$	$5.26\ 10^{4}$	$8.25\ 10^{-9}$	$1.67\ 10^{-12}$	$5.11\ 10^{-12}$		
150^o K	$2.83\ 10^{-16}$	$1.29\ 10^{6}$	$6.1\ 10^{6}$	$2.0\ 10^{7}$	$1.33\ 10^{-8}$	$1.85\ 10^{-12}$	$5.25\ 10^{-6}$	10^{-5}	10^{-6}
200^o K	$2.58\ 10^{-16}$	$1.31\ 10^{6}$	$3.39\ 10^{7}$	$1.97\ 10^{8}$	$1.85\ 10^{-8}$	$2.20\ 10^{-12}$	$6.14\ 10^{-3}$		
250^o K	$2.33\ 10^{-16}$	$1.32\ 10^{6}$	$1.24\ 10^{8}$	$1.25\ 10^{9}$	$2.33\ 10^{-8}$	$2.82\ 10^{-12}$	$4.61\ 10^{-1}$		
300^o K	$2.23\ 10^{-16}$	$1.34\ 10^{6}$	$3.49\ 10^{8}$	$4.57\ 10^{9}$	$2.77\ 10^{-8}$	$3.07\ 10^{-12}$	$8.53\ 10^{0}$		

Tabelle 11: Einteilchenübergangswahrscheinlichkeiten für KI

Literatur

/1/ Stumpf, H.: Phys. cond. Matter 18, 217-248 (1974)

/2/ Stumpf, H.: Z. Physik 229, 448 (1969)

/3/ Huang, Rhys: Proc. Roy. Soc. A204, 406 (1950)

/4/ Stumpf, H.: Quantentheorie der Ionenkristalle, Springer 1961

/5/ Schmid, J.: Phys. cond. Matter 15, 119 (1972)

/6/ Renn, W.: Phys. cond. Matter 17, 233 (1974)

/7/ Heinzel, W.: Thesis, Universität Tübingen, 1973

/8/ Toyozawa, Y.: Progr. Theor. Physics 13, 160 (1955)

/9/ Rieckers, Stumpf: Thermodynamik 2, Vieweg Verlag 1977

/10/ Fraser, S.: Phys. cond. Matter 17, 71 (1974)

/11/ Koide, S.: Z. Naturforschung 15a, 123 (1960)

/12/ Heinzel, W.: Phys. cond. Matter 17, 99 (1974)

/13/ Stumpf, H.: Phys. cond. Matter 13, 101 (1971)

/14/ Trautenberg, E.: Phys. cond. Matter 16, 163 (1973)

/15/ Stumpf, H.: Phys. cond. Matter 13, 9 (1971)

/16/ Landsberg, Rhys-Roberts: Proc. Phys. Soc. 84, 915 (1964)

/17/ Landsberg, P.T.: Phys. Stat. Solidi 41, 457 (1970)

/18/ Landsberg, Adams: Proc. Roy. Soc. London A334, 523 (1973)

/19/ Hill, Landsberg: Proc. Roy. Soc. London A347, 547 (1976)

/20/ Hill, D.: Proc. Roy. Soc. London A347, 565 (1976)

/21/ Hill, D.: J. Phys. C: Solid State Physics 9, 3527 (1976)

/22/ Haug, A.: Festkörperprobleme XII, 411 (1972)

/23/ Schöne, D.: Z. Naturforschung 24a, 1752 (1969)

/24/ Eagles, D.M.: Proc. Phys. Soc. 78, 204 (1961)

/25/ Rosenthal, W.: Thesis, Universität Berlin, 1972

/26/ Haug, A.: Theoretische Festkörperphysik, Band II, Deutike 1970

/27/ Schöll, E.: Diplomarbeit, Institut für Theoretische Physik, Universität Tübingen, 1976

/28/ Kreyszig, E.: Statistische Methoden und ihre Anwendung, Vandenhoeck & Ruprecht

/29/ Rosier, Sah: Solid State Electron. 14, 41 (1971)

/30/ McCombs, Milnes: Int. J. Electronics 32, 361 (1971)

/31/ Stumpf, H.: Quantum Processes in Semiconductors (in Vorbereitung)

/32/ Kleih, W.: Thesis, Universität Tübingen (in Vorbereitung)

/33/ Sieber, A.: Thesis, Universität Tübingen, 1973

/34/ Seeger, K.: Semiconductor Physics, Springer

/35/ Schiff, : Qauntum Mechanics, New York: McGraw-Hill 1968

/36/ Ahrenkiel, Brown: Phys. Rev. 136, A223 (1964)

/37/ Rojas, I.: Diplomarbeit, Institut für Theoretische Physik, Universität Tübingen, 1973

/38/ Rupprecht, P.: persönliche Mitteilung

/39/ Gradshteyn, Ryzhik: Table of Integrals, Series and Products, Academic Press

/40/ Landsberg, Evans, Rhys-Roberts: Proc. Phys. Soc. 83, 325 (1964)

/41/ Gantmacher, F.R.: Matrizenrechnung, Deutscher Verlag der Wissenschaften

/42/ Blaquière, A.: Nonlinear Systems Analysis, New York: Academic Press

/43/ Willems, J.L.: Stability Theory of Dynamical Systems, London: Nelson

/44/ Cunningham, W.J.: Introduction to Nonlinear Analysis, New York: McGraw-Hill

/45/ Kleih, W.: Diplomarbeit, Institut für Theoretische Physik, Universität Tübingen, 1977

/46/ Schöll, E.: Thesis, University of Southampton, 1977

/47/ Rojas, I.: Thesis, Universität Tübingen, 1978

/48/ Hoffmann, H.J.: Phys. Stat. Sol. (b) 57, 123 (1973)

/49/ Lüty, F.: Elektronenübergänge in Farbzentren, Halbleiterprobleme VI

/50/ Miehlich, A.: Z. Physik 176, 168 (1963)

/51/ Lüty, F.: J. Phys. Chem. Solids 22, 299 (1961)

/52/ Benci, Manfredi: Phys. Rev. B7, 1549 (1973)

/53/ Honda, Tomura: J. Phys. Soc. Japan 33, 1003 (1972)

/54/ Bartram, Stoneham: Solid State Comm. 17, 1593 (1975)

/55/ Bosi, L.: Phys. Stat. Sol. (b) 75, K163 (1976)

/56/ Crandall, R.: Phys. Rev. 138, A1242 (1964)

/57/ Hoffmann, Stöckmann, Tödheide-Haupt: Phys. Stat. Sol. (b) 56, 549 (1973)

/58/ Wahl, Wille: Z. Naturforschung 21a, 304 (1965)

/59/ Gröbner, Knapp: Contributions to the Method of Lie Series, Bibliographisches Institut 802/802a, Mannheim

/60/ Hofelich, Abate, Hofelich: Z. Physik 209, 13 (1968)

/61/ Wait, De France: Dare P User's Manual, Manuskript (1976)

/62/ Alan, Pritsker: The Gasp IV, Simulation Language (1973)

/63/ Wagner, M.: Z. Naturforschung 14a, 81 (1959)

/64/ Witchel, W.: J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 6, 527 (1973)

/65/ Berezin, A.A.: Sov. Phys. Sol. State 11, 1285 (1969)

/66/ Sherman, J.: Chem. Rev. 11, 93 (1932)

/67/ Spinolo, G.: Phys. Rev. 137, A1495 (1965)

/68/ Park, K.: Phys. Rev. 140, A1735 (1965)

/69/ Gebhardt, Kühnert: Phys. Letters 11, 15 (1964)

Lebenslauf

Eltern:	Elfriede (geb. Nägele) und Josef Tröster, wohnhaft in Hessigheim
26. Mai 1950:	in Hessigheim, Kreis Ludwigsburg, geboren
Frühjahr 1957:	Volksschulbeginn in Hessigheim
Frühjahr 1961:	Besuch des Progymnasiums in Besigheim
September 1967:	Übertritt in das Gymnasium Bietigheim
Juni 1970:	Abschluß des Gymnasiums mit dem Abitur
Oktober 1970:	Studienbeginn der Fächer Physik und Mathematik im Diplomstudiengang an der Universität Tübingen
Mai 1972:	Vordiplom in Mathematik
Oktober 1972:	Vordiplom in Physik
April 1973:	Eheschließung mit Hildegard Eisele
September 1976:	Studienabschluß in Physik als Diplom-Physiker; die Diplomarbeit wurde im Institut für Theoretische Physik der Universität Tübingen angefertigt
Oktober 1976:	Beginn der Dissertation bei Professor Stumpf auf dem Gebiet der Theoretischen Festkörperphysik
Juli 1977:	Geburt unserer Tochter Mirjam

Vorlesungen bei: Stumpf, Wahl, Mitter, Schmid, Wildermuth, Staudt, Gönnenwein, Möllenstedt, Krüger, Mack, Trümper, Viebahn, Schief, Breitling, Kramer, Höhn, Elwert, Speidel, Hahn, Nagel, Wolf, Dähn, Beekmann, Schulz, Michler, Grölz

Offsetdruck Spengler
Lessingstraße 4 · 7401 Neustetten 1
Telefon (07472) 22145